



Approche thermodynamique pour la commande d'un système non linéaire de dimension infinie : application aux réacteurs tubulaires

Weijun Zhou

► To cite this version:

Weijun Zhou. Approche thermodynamique pour la commande d'un système non linéaire de dimension infinie : application aux réacteurs tubulaires. Automatique / Robotique. Université Claude Bernard - Lyon I, 2015. Français. NNT : 2015LYO10084 . tel-01186229

HAL Id: tel-01186229

<https://theses.hal.science/tel-01186229>

Submitted on 24 Aug 2015

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

N°d'ordre : 84 - 2015

Année 2015

THÈSE DE L'UNIVERSITÉ DE LYON

ÉCOLE DOCTORALE EEA DE LYON

DIPLÔME DE DOCTORAT

Spécialité : AUTOMATIQUE

par **M.Weijun Zhou**

**Approche thermodynamique pour la commande d'un système
non linéaire de dimension infinie : application aux réacteurs
tubulaires**

Directeur de thèse : Mme Françoise Couenne

Co-direction : M. Yann Le Gorrec et M. Boussad Hamroun

Thèse soutenue le 22 juin 2015

JURY

Rapporteurs :

M. Denis Dochain	Professeur, Université catholique de Louvain
M. Didier Georges	Professeur, Grenoble INP
M. Laurent Lefèvre	Professeur, Grenoble INP

Examineurs :

Mme. Françoise Couenne	Chargée de recherche CNRS
M. Yann Le Gorrec	Professeur, ENSMM Besançon
M. Bernhard Maschke	Professeur, Université Claude Bernard Lyon 1

Invité :

M. Boussad Hamroun	Maître de conférence, Université Claude Bernard Lyon 1
--------------------	--

To my family and friends

Remerciement

Ce travail a été effectué au sein du Laboratoire d'Automatique et de Génie des Procédés (LAGEP) dans l'équipe 'Dynamique et Commande des Procédés' à l'Université Claude Bernard Lyon 1. Je remercie en premier lieu Monsieur Hatem Fessi, directeur du LAGEP, ainsi que l'ensemble des membres du LAGEP pour m'avoir accueilli au sein de son laboratoire.

Je remercie Monsieur Denis Dochain de m'avoir fait l'honneur d'être rapporteur de cette thèse et pour les remarques qu'il a formulées. Je remercie vivement Monsieur Laurent Lefèvre d'avoir accepté de rapporter ce travail. Ses précieux conseils, son sens critique et sa rigueur scientifique m'ont beaucoup apportés et permis la correction de diverses erreurs et imprécisions. Je souhaite également remercier M Didier George très chaleureusement pour avoir accepté d'évaluer ces travaux, pour ses conseils et ses remarques très constructives.

J'adresse mes remerciements les plus sincères à Monsieur Bernhard Maschke, Professeur à l'Université Lyon 1, pour m'avoir accueilli au sein de son équipe de recherche au LAGEP, pour m'avoir aidé énormément à trouver les soutiens financiers et résoudre des problèmes administratifs, et d'avoir été présent chaque fois que nécessaire, ainsi que d'avoir accepté d'examiner mon mémoire et de présider mon jury de thèse.

Je tiens à exprimer toute ma profonde reconnaissance à ma directrice de thèse, Madame Françoise Couenne, pour ces trois années passées au sein du LAGEP. Je le remercie chaleureusement pour m'avoir encadré ce travail, pour ses qualités humaines et surtout ses qualités scientifiques, qui m'ont permis de réaliser cette thèse dans les meilleures conditions possibles. Qu'elle trouve ici toute ma gratitude pour sa patience, pour m'avoir formé en automatique, et initié à ce monde privilégié de la recherche.

Je remercie très particulièrement Monsieur Yann Le Gorrec, Professeur à l'Université Lyon 1, pour sa rigueur scientifique et la confiance qu'il m'a témoignée. Sans son soutien et ses encouragements, ce travail n'aurait pu aboutir.

Cette thèse n'aurait certainement pas abouti sans l'aide de Monsieur Boussad Hamroun, Maître de conférence à l'Université Lyon 1. Je t'exprime toute ma gratitude et ma reconnaissance pour ton aide, tes conseils et la confiance que tu m'as témoignée.

Merci à tous les membres de l'équipe de recherche Dynamique et Commande des Procédés du LAGEP pour m'avoir accueilli aussi chaleureusement parmi eux. Merci à Christian, Claire, Valérie, Émilie et tous les professeurs et maîtres de conférences qui m'ont reçu dans leurs

équipes de recherches et d'enseignements, pour leur aide, leurs conseils précieux.

Je souhaite remercier tous les personnels du service technique et administratif du LAGEP pour leur dévouement au laboratoire, leur grande efficacité et sérénité. Merci à Nadia, Olivier, Jean-Pierre et Sébastien.

Je tiens à remercier tous ceux qui m'ont prêté main forte : Yongxin, Jing, Mohamed, li, Yousera, Chouaib, Johan, Jun, Hector et Mamadou, doctorants et docteurs, pour leur sympathie, leur aide et leur générosité, en somme pour tout ce que nous avons partagé au cours de ces trois dernières années.

Un grand merci à tous mes amis à Lyon pendant mes séjours depuis 2005 : Zili, Yuebin, Wei, Xiao, Liang, encore en France ou déjà rentrés en Chine, pour ces dix ans que nous avons passé ensemble, les très bons moments que nous avons partagés et l'aide que vous m'avez donné,

Je dédie ce travail à mes chers parents sans qui je ne serais pas là. Je les remercie infiniment pour leur amour, leur confiance et leur soutien inconditionnel pendant ces années.

UNIVERSITE CLAUDE BERNARD - LYON 1

Président de l'Université

Vice-président du Conseil d'Administration

Vice-président du Conseil des Etudes
et de la Vie Universitaire

Vice-président du Conseil Scientifique

Directeur Général des Services

M. François-Noël GILLY

M. le Professeur Hamda BEN HADID

M. le Professeur Philippe LALLE

M. le Professeur Germain GILLET

M. Alain HELLEU

COMPOSANTES SANTE

Faculté de Médecine Lyon Est - Claude Ber-
nard

Directeur : M. le Professeur J. Etienne

Faculté de Médecine et de Maieutique Lyon
Sud

Directeur : Mme la Professeure C. BURILLON

- Charles Mérieux

UFR d'Odontologie

Directeur : M. le Professeur D. Bourgeois

Institut des Sciences Pharmaceutiques
et Biologiques

Directeur : Mme la Professeure C. VINCIGUERRA

Institut des Sciences et Techniques de
la Réadaptation

Directeur : M. le Professeur Y. Matillon

Département de formation et Centre
de Recherche en Biologie Humaine

Directeur : Mme. la Professeure A-M. SCHOTT

COMPOSANTES ET DEPARTEMENTS DE SCIENCES ET TECHNOLOGIE

Faculté des Sciences et Technologies

Directeur : M. le Professeur F. DE MARCHI

Département Biologie

Directeur : M. le Professeur F. FLEURY

Département Chimie Biochimie

Directeur : Mme Caroline FELIX

Département GEP

Directeur : M. Hassan HAMMOURI

Département Informatique

Directeur : M. le Professeur S. AKKOUCHE

Département Mathématiques

Directeur : M. le Professeur Georges TOMANOV

Département Mécanique

Directeur : M. le Professeur H. BEN HADID

Département Physique

Directeur : M. Jean-Claude PLENET

UFR Sciences et Techniques des Activités

Directeur : M. Y. VANPOULLE

Physiques et Sportives

Observatoire des Sciences de l'Univers de Lyon
Polytech Lyon

Directeur : M. B. GUIDERDONI

Directeur : M. P. FOURNIER

Ecole Supérieure de Chimie Physique Electro-
nique

Directeur : M. G. PIGNAULT

Institut Universitaire de Technologie de Lyon
1

Directeur : M. le Professeur C. VITON

Ecole Supérieure du Professorat et de l'Educa-
tion

Directeur : M. le Professeur A. MOUGNIOTTE

Institut de Science Financière et d'Assurances

Directeur : M. N. LEBOISNE

Table des matières

Table des matières	i
Liste des figures	vi
Liste des tables	viii
Nomenclature	1
0 Introduction générale	5
0.1 Position du problème	5
0.2 Organisation du document et principales contributions	6
1 Représentation thermodynamique du réacteur tubulaire	9
1.1 Introduction	9
1.1.1 Organisation du chapitre	9
1.1.2 Mes contributions	10
1.2 Les fondements thermodynamiques de la modélisation du réacteur	10
1.2.1 La thermodynamique à l'équilibre	10
1.2.2 Les deux premiers principes	13
1.2.3 Le principe du minimum d'énergie à l'équilibre thermodynamique	14
1.2.4 L'hypothèse d'équilibre local pour les systèmes hors équilibre	15
1.2.5 Cas des systèmes à pression constante	17
1.2.6 L'équation de Gibbs Duhem	18
1.3 Les hypothèses de modélisation	19
1.3.1 La convection	20
1.3.2 La dispersion	20
1.3.3 La dispersion thermique	21
1.3.4 La réaction chimique	21
1.4 Le modèle du réacteur tubulaire	21
1.4.1 Les bilans de matière	21
1.4.2 Le bilan d'énergie	22
1.4.3 Le bilan d'entropie	22

1.4.4	La production irréversible d'entropie	22
1.5	Représentation entropique du réacteur tubulaire	23
1.5.1	Le modèle standard du génie des procédés	24
1.6	Représentation énergétique du réacteur tubulaire	25
1.7	Les modèles d'interface aux frontières et les conditions frontières	25
1.7.1	Modèle d'interface	25
1.7.2	Les conditions aux frontières	28
1.7.2.1	Production irréversible d'entropie aux frontières	28
1.8	Simulation du réacteur en boucle ouverte	28
1.8.1	Réduction spatiale pour la simulation	29
1.8.1.1	Le modèle discretisé	29
1.8.2	Valeurs numériques et conditions opératoires	31
1.8.3	Résultats de simulation	31
1.9	Conclusion et perspectives	32
2	Disponibilité	35
2.1	Introduction	35
2.1.1	Historique de la fonction de disponibilité thermodynamique	35
2.1.2	Organisation du chapitre	36
2.2	Mes contributions	36
2.3	La disponibilité thermodynamique en dimension finie	36
2.3.1	L'interprétation géométrique	37
2.3.2	Les propriétés de la disponibilité thermodynamique	37
2.3.3	Fonction de Lyapunov et disponibilité thermodynamique	40
2.3.4	Disponibilité thermodynamique en vision énergétique	40
2.4	La fonction de disponibilité en dimension infinie	42
2.4.1	Formulation locale de la disponibilité	42
2.4.2	Les propriétés de la densité de disponibilité	42
2.4.3	Droite singulière en dimension infinie	45
2.4.4	La dynamique de la disponibilité	46
2.4.5	Utilisation de la disponibilité pour étudier la passivité en boucle ouverte	47
2.4.5.1	Cas linéaire et sans convection	47
2.4.5.2	Cas linéaire avec convection	48
2.4.6	Illustration de la disponibilité en boucle ouverte	49
2.5	La fonction de disponibilité réduite en dimension finie	51
2.5.1	Propriétés	52
2.6	La fonction de disponibilité réduite en dimension infinie	55
2.6.1	Formulation locale de la disponibilité réduite	55
2.6.2	Propriété	56

2.6.3	La dynamique de la disponibilité réduite locale et globale	56
2.6.4	Illustration de la disponibilité réduite locale en boucle ouverte	58
2.7	Conclusion	59
3	Commande stabilisante distribuée du réacteur tubulaire	61
3.1	Mes contributions	61
3.2	Bibliographie sur la commande des réacteurs et position du problème	62
3.2.1	Commande du RPAC : bibliographie	62
3.2.2	Commande du Réacteur tubulaire : bibliographie	62
3.2.2.1	Classification des problèmes du commandes	62
3.2.2.2	Classification des méthodes de synthèse et des modèles utilisés	63
3.2.3	Commande par inventaires des réacteurs	64
3.3	Position du problème de commande	64
3.4	Synthèse de commandes stabilisantes utilisant la disponibilité thermodynamique	65
3.4.1	Résultat de simulation	67
3.5	Commande stabilisante avec la disponibilité réduite	71
3.5.1	Résultat de simulation	75
3.6	Rejet de perturbation	79
3.7	Approche pratique de la commande distribuée	79
3.7.1	Commande quasi-distribuée avec k intervalles	80
3.7.2	Commande uniforme	82
3.8	Conclusion et perspectives	85
4	Représentation hamiltonienne à port du réacteur tubulaire	87
4.1	Introduction et mes contributions	87
4.1.1	Mes contributions	88
4.1.2	Organisation du chapitre	88
4.2	Représentation en dimension infinie des systèmes hamiltoniens à port	89
4.2.1	La ligne de transmission sans perte	89
4.2.2	La ligne de transmission avec perte	91
4.2.3	La ligne de transmission avec perte avec représentation du domaine thermique	92
4.2.4	Conclusion	95
4.3	Représentation hamiltonienne à port en vision énergétique	96
4.3.1	Formulation énergétique du modèle réaction-diffusion	96
4.3.2	Représentation hamiltonienne du modèle réaction-diffusion	97
4.3.3	Représentation pseudo-hamiltonienne du modèle de réaction diffusion .	104
4.3.4	Conclusion	107
4.4	Représentation hamiltonienne à port en vision entropique	107

4.4.1	Formulation entropique du modèle réaction-diffusion	108
4.4.2	Représentation hamiltonienne du modèle réaction-diffusion en vision entropique	108
4.4.3	Représentation pseudo hamiltonienne du modèle réaction-diffusion . .	110
4.4.4	Conclusion	114
4.5	Conclusion et perspectives	114
5	Problème de commande à la frontière	115
5.1	Motivation et mes contributions	115
5.2	Systèmes Hamiltoniens à ports dissipatifs	116
5.3	Existence de solution : Application aux systèmes isothermes	119
5.3.1	Cas A : Opérateurs différentiels non canoniques	119
5.3.2	Cas B : Opérateurs différentiels canoniques	121
5.4	Représentation linéarisée	123
5.5	Existence de solutions pour le modèle linéarisé	124
5.6	Conclusion et perspectives	126
6	Conclusion	127
6.1	Conclusion générale	127
6.2	Perspective	128
	Bibliography	129
	Annexe	138
.1	Le modèle du réacteur réaction-diffusion	139
.2	Le modèle linéarisé pour la commande frontière	141
.2.1	Linéarisation du flux de conduction $F_{cond}^h = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}$	141
.2.2	Linéarisation des flux convectifs $F_{conv}^i = \theta_i v$	141
.2.3	Linéarisation des flux de dispersion $F_{dis}^i = -D \frac{\partial \rho_i}{\partial x} = -D \rho \frac{\partial \theta_i}{\partial x}$	142
.2.4	Linéarisation de $F_{conv}^h = \rho v (\theta_A h_A + \theta_B h_B)$ et $F_{dis}^h = F_{dis}^A h_A + F_{dis}^B h_B$.	142
.2.4.1	Linéarisation de la réaction	143
.2.4.2	Le modèle linéarisé	144
.3	Transparent de soutenance	145

Table des figures

1.7.1 Les flux en interface	26
1.8.1 Réponse temporelle du système	32
1.8.2 Validation numérique de l'équation de Gibbs-Duhem	33
2.3.1 Représentation de la fonction de la disponibilité par rapport l'état de référence Z_d .	38
2.3.2 La fonction de la disponibilité et la droite singulière	39
2.3.3 Représentation de la disponibilité A_u par rapport à l'état de référence Z_{u_d}	41
2.4.1 La disponibilité locale avec $v = 0.01m/s$ et $v = 0.005m/s$	50
2.4.2 La disponibilité locale avec $v = 0.003m/s$ et $v = 0.001m/s$	50
2.4.3 La disponibilité globale à différentes vitesses de convection	51
2.4.4 La disponibilité globale sans convection	51
2.6.1 La disponibilité réduite locale avec $v = 0.01m/s$ et $v = 0.005m/s$	58
2.6.2 La disponibilité réduite locale avec $v = 0.003m/s$ et $v = 0.001m/s$	58
2.6.3 La disponibilité réduite locale avec $v = 0.01m/s$ et $v = 0.005m/s$	59
2.6.4 La disponibilité réduite locale avec $v = 0.003m/s$ et $v = 0.001m/s$	59
3.4.1 Erreurs de stabilisation pour T et θ_B en boucle fermée avec la commande T_{j_1}	68
3.4.2 La commande T_{j_1}	68
3.4.3 La disponibilité locale en boucle fermée avec la commande T_{j_1}	69
3.4.4 La disponibilité globale en boucle fermée avec la commande T_{j_1}	69
3.4.5 Le gain K_1	70
3.4.6 Erreurs de stabilisation pour T et θ_B en boucle fermée avec la commande T_{j_2}	70
3.4.7 La commande T_{j_2}	71
3.4.8 La disponibilité locale en boucle fermée avec la commande T_{j_2}	71
3.4.9 La disponibilité globale avec la commande T_{j_2}	72
3.5.1 Erreurs de stabilisation pour T et θ_B en boucle fermée avec la commande T_{j_3}	75
3.5.2 La commande T_{j_3}	76
3.5.3 La disponibilité réduite locale a_r en boucle fermée avec la commande T_{j_3}	76
3.5.4 La disponibilité globale A et la disponibilité globale réduite A_r avec la commande T_{j_3}	76
3.5.5 Erreurs de stabilisation pour T et θ_B en boucle fermée avec la commande T_{j_4}	77
3.5.6 La commande T_{j_4}	78

3.5.7 La disponibilité réduite locale a_r en boucle fermée avec la commande T_{j_4}	78
3.5.8 La disponibilité globale A et disponibilité globale réduite A_r avec la commande T_{j_4}	78
3.6.1 Erreur entre T et T_d à $t = 5000s$ en boucle ouverte en présence de perturbation	79
3.6.2 Erreur entre T et T_d à $t = 5000s$ en boucle fermée en présence de perturbation avec T_{j_3}	80
3.6.3 La commande T_{j_3} pour le rejet de perturbation	80
3.7.1 Erreurs de stabilisation pour T et θ_B en boucle fermée avec la commande T_{j_3} appliquée sur 5 intervalles	81
3.7.2 Profil final de l'erreur entre θ_B et θ_{Bd}	81
3.7.3 Profil final de l'erreur entre T et T_d	82
3.7.4 Commande T_{j_3} avec 5 intervalles	82
3.7.5 La disponibilité réduite locale avec la commande T_{j_3} appliquée sur 5 intervalles	83
3.7.6 Profil spatial final de la disponibilité réduite locale avec la commande T_{j_3} appliquée sur 5 intervalles	83
3.7.7 Erreurs de stabilisation pour T et θ_B en boucle fermée avec la commande T_{j_5}	84
3.7.8 La commande uniforme T_{j_5}	84
3.7.9 La disponibilité réduite locale pour la commande uniforme T_{j_5}	85

Liste des tableaux

1.1	Valeur numérique des paramètres.	32
4.1	Couples flux-effort thermodynamiques en vision énergétique	97
4.2	Couples flux-effort supplémentaires en vision énergétique	98
4.3	Couples flux-effort en vision énergétique - représentation pseudo hamiltonienne	105
4.4	Les couples flux effort en vision entropique	109
4.5	Les couples flux effort en vision entropique- représentation pseudo hamiltonienne	111
1	Coefficients du modèle linéarisé	144

Nomenclature

Lettres latines

$\mathcal{A} \text{ (} J \text{)}$	Affinité chimique
$A \text{ (} J \text{ K}^{-1} \text{)}$	Disponibilité thermodynamique globale
$a \text{ (} J \text{ K}^{-1} m^{-1} \text{)}$	Disponibilité thermodynamique locale
$c_{p_i} \text{ (} J \text{ K}^{-1} g^{-1} \text{)}$	Capacité thermique massique du constituant i
$c_p \text{ (} J \text{ K}^{-1} g^{-1} \text{)}$	Capacité thermique massique totale
$C \text{ (} W \text{ K}^{-1} \text{)}$	Coefficient d'échange de chaleur thermique
$D \text{ (} g \text{ m}^{-1} \text{)}$	Coefficient de diffusion
$E \text{ (} J \text{ mole}^{-1} \text{)}$	Énergie d'activation
$F_{conv}^s \text{ (} J \text{ K}^{-1} m^{-1} \text{)}$	Flux convectifs d'entropie totale
$F_{conv}^h \text{ (} J \text{ m}^{-1} \text{)}$	Flux convectifs d'enthalpie totale
$F_{conv}^i \text{ (} g \text{ m}^{-1} \text{)}$	Flux convectifs du constituant i
$F_{cond}^h \text{ (} J \text{ m}^{-1} \text{)}$	Flux de dispersion thermique
$F_{dis}^s \text{ (} J \text{ K}^{-1} m^{-1} \text{)}$	Flux dispersifs d'entropie totale
$F_{dis}^h \text{ (} J \text{ m}^{-1} \text{)}$	Flux dispersifs d'enthalpie totale
$F_{dis}^i \text{ (} g \text{ m}^{-1} \text{)}$	Flux dispersifs du constituant i
$F_h \text{ (} J \text{ m}^{-1} \text{)}$	Flux d'enthalpie totale
$F_i \text{ (} g \text{ m}^{-1} \text{)}$	Flux total lié à l'espèce i
$F_i^{in} \text{ (} g \text{ m}^{-1} \text{)}$	Débit massique partiel d'entrée de espèce i
$F_s \text{ (} J \text{ K}^{-1} m^{-1} \text{)}$	Flux d'entropie totale

H (J)	Enthalpie globale
h ($J\ g^{-1}$)	Enthalpie locale massique
h_i ($J\ g^{-1}$)	Enthalpie spécifique de l'espèce i
h_i^{in} ($J\ g^{-1}$)	Enthalpie massique partielle d'entrée de l'espèce i
$h_{i_{ref}}$ ($J\ g^{-1}$)	Enthalpie spécifique de référence de l'espèce i
\mathcal{J} ($-$)	Opérateur anti-symétrique canonique de la formulation hamiltonienne
k_0 ($-$)	Constante cinétique du réaction
L (m)	Longueur du réacteur
M_A ($g\ mole^{-1}$)	Masse molaire de l'espèce i
P (Pa)	Pression hydrostatique
q ($J\ m^{-1}$)	Échange de chaleur distribué avec la double enveloppe
R ($Jmol^{-1}K^{-1}$)	Constante des gaz parfaits
r ($J\ m^{-1}$)	Vitesse de réaction
S ($J\ K^{-1}$)	Entropie globale
s ($J\ K^{-1}m^{-1}$)	Entropie locale massique
s_i ($J\ K^{-1}m^{-1}$)	Entropie spécifique de l'espèce i
s_i^{in} ($J\ K^{-1}m^{-1}$)	Entropie massique partielle d'entrée de l'espèce i
$s_{i_{ref}}$ ($J\ K^{-1}m^{-1}$)	Entropie spécifique de référence de l'espèce i
T (K)	Température au sein du réacteur
T_{in} (K)	Température d'entrée
T_j (K)	Température distribuée de double enveloppe
T_{ref} (K)	Température de référence
U (J)	Énergie globale
u (J)	Énergie locale massique
V (m^3)	Volume
v (ms^{-1})	Vitesse de convection
Z ($-$)	Variable extensive
z ($-$)	Variable extensive locale massique

Lettres grecques

θ_i (—)	Fraction massique du constituant i
$\theta_{i_{in}}$ (—)	Fraction massique d'entrée du constituant i
ρ ($g\ m^{-1}$)	Masse volumique totale
ρ_i ($g\ m^{-1}$)	masse linéique du constituant i
ρ_{in} ($g\ m^{-1}$)	masse linéique d'entrée
$\rho_{i_{in}}$ ($g\ m^{-1}$)	masse linéique d'entrée du constituant i
λ ($W\ K^{-1}$)	Coefficient de dispersion thermique
ν_i (—)	Coefficients stœchiométriques du constituant i
μ_i ($J\ g^{-1}$)	Potentiel chimique massique du constituant i
Σ_I ($W\ K^{-1}$)	Production d'entropie créée en interface
σ_s ($W\ K^{-1}$)	Production irréversible d'entropie totale au sein du réacteur
σ_{ext} ($W\ K^{-1}$)	σ due à l'échange avec l'extérieur par double enveloppe
σ_r ($W\ K^{-1}$)	σ due à la réaction
σ_i ($W\ K^{-1}$)	σ due à la dispersion matérielle d'espèce i
σ_S ($W\ K^{-1}$)	σ due à la dispersion thermique exprimé en fonction de flux d'entropie
σ_H ($W\ K^{-1}$)	σ due à la dispersion thermique exprimé en fonction de flux d'enthalpie

Chapitre 0

Introduction générale

0.1 Position du problème

Le travail présenté dans cette thèse porte sur la modélisation et la commande des réacteurs chimiques tubulaires.

Les réacteurs chimiques peuvent être définis comme étant des procédés sièges de réactions chimiques. Leurs modèles se différencient par leur géométrie : réacteurs agités ou réacteurs tubulaires, et par leur mode d'utilisation : réacteurs continus, fermés (batch), semi-continus [85].

Le réacteur tubulaire est un tube qui peut atteindre jusqu'à plusieurs dizaines de mètres au sein duquel ont lieu des réactions chimiques ainsi que d'autres phénomènes tels que la convection de la matière et de la dispersion. Le réacteur tubulaire est par nature exploité en mode continu. C'est un procédé dont les propriétés dynamiques dépendent des variables d'espace qui sera représenté par un modèle décrit par des Équations aux Dérivées Partielles (EDP)[21]. La littérature concernant la modélisation des réacteurs en dimension infinie est très fournie [21, 24, 29, 72]. Par ailleurs les lois constitutives thermodynamiques et les cinétiques de réaction sont en général très non linéaires [24] ce qui rend le problème de commande de ce procédé très complexe.

Le problème de commande des réacteurs tubulaires a été abordé par de nombreux chercheurs par différentes méthodes : soit en synthétisant des contrôleurs à partir du système linéarisé en dimension infinie [63, 3], soit en se basant sur des méthodes de réduction spatiale et en synthétisant un contrôleur en dimension finie [25, 90, 57, 61].

Dans cette thèse nous abordons le problème de commande sur ce système non linéaire en nous appuyant sur ses propriétés thermodynamiques. L'utilisation de cette approche nécessite l'utilisation d'un modèle ayant comme variables d'état les variables thermodynamiques classiques (les variables extensives) sur lesquelles nous écrirons les bilans avec la contrainte que ces bilans vérifient l'équation de Gibbs [29]. Une des variables thermodynamiques, l'énergie ou l'entropie n'apparaît pas explicitement dans le modèle mais est reliée aux autres variables

d'état par l'équation de Gibbs. Le modèle ainsi obtenu varie par rapport aux modèles précédemment cités utilisés dans les travaux portant sur la commande : la capacité calorifique totale et l'enthalpie de réaction sont des fonctions non linéaires de l'état.

L'approche thermodynamique a déjà été utilisée pour la synthèse de commandes stabilisantes non linéaires du modèle du Réacteur Parfaitement Agité Continu (RPAC) [44, 46] en utilisant des fonctions issues de la thermodynamique comme fonction de Lyapunov.

Dans cette thèse nous avons souhaité généraliser cette démarche au cas du réacteur tubulaire en prenant en compte le caractère distribué du modèle.

Par la suite, nous proposons de revenir à des aspects de modélisation afin de mettre en avant la structure sous-jacente des équations et leur potentielle utilisation à des fins de discrétisation ou de commande. L'objectif est d'obtenir une représentation similaire à la représentation Hamiltonienne pour ce type de système irréversible. La représentation thermodynamique du réacteur tubulaire constitue un premier pas vers sa représentation hamiltonienne à port puisque ces deux représentations utilisent les mêmes grandeurs physiques, les variables d'état et les variables de co-état dans l'écriture des modèles dynamiques. Ces variables sont définies à partir d'un hamiltonien, qui pour la représentation thermodynamique est soit l'énergie (on parle alors de représentation énergétique) soit l'entropie (représentation entropique). L'obtention d'une telle représentation hamiltonienne permettra à échéance d'utiliser, pour la commande du réacteur tubulaire, tous les outils existants pour la commande des systèmes hamiltoniens à port [32].

0.2 Organisation du document et principales contributions

Ce mémoire est organisé en cinq chapitres qui s'articulent de la façon suivante :

Le chapitre 1 concerne la modélisation du réacteur tubulaire. Nous rappelons les propriétés fondamentales de la thermodynamique sur lesquelles repose le modèle du réacteur tubulaire. Ces propriétés seront utilisées aussi au Chapitre 2. Nous présentons ensuite les représentations énergétiques et entropiques du modèle de réacteur tubulaire puis les conditions aux frontières qui sont considérées. En particulier nous montrons l'existence, à la frontière amont du réacteur, d'une production irréversible d'entropie due au mélange entre les constituants d'alimentation et le début du réacteur qui ne sont pas dans le même état thermodynamique. Nous terminons le chapitre en proposant un modèle discrétisé par la méthode des différences finies. Ce modèle servira pour les simulations numériques présentées dans la suite de la thèse.

Le chapitre 2 est dédié à la présentation des deux fonctions de Lyapunov candidates, la disponibilité thermodynamique et la disponibilité thermodynamique réduite, qui seront utilisées pour la synthèse de commande développée au chapitre 3. Nous rappelons la définition de la disponibilité thermodynamique et ses propriétés en dimension finie puis en dimension infinie. En dimension infinie nous montrons comment on peut utiliser cette fonction pour étudier la passivité du réacteur tubulaire. Nous présentons quelques résultats de simulation sur la

disponibilité pour le réacteur tubulaire. Nous montrons que la disponibilité thermodynamique est composée de deux termes, tous deux positifs. Nous utilisons le terme qui est affine par rapport aux fractions molaires (et / ou massiques) comme fonction de Lyapunov alternative. Nous l'appelons disponibilité réduite. Nous développons ensuite les propriétés de la disponibilité réduite en dimension finie puis en dimension infinie. Nous illustrons en simulation sur le système en boucle ouverte les différences de comportement entre ces deux fonctions.

Le chapitre 3 concerne la synthèse de lois de commande en utilisant les deux fonctions de disponibilité comme fonction de Lyapunov. Ce chapitre suppose l'existence des solutions du système d'EDPs considéré. Dans un premier temps, nous présentons une bibliographie sur la commande des réacteurs tubulaires. Nous établissons ensuite le problème de commande que nous souhaitons résoudre en utilisant la disponibilité thermodynamique comme fonction de Lyapunov et en prenant la température de double enveloppe comme commande distribuée.

Plusieurs stratégies de commande sont abordées pour lesquelles nous avons montré la stabilité asymptotique globale du système en boucle fermée. Des simulations illustrent ces résultats ainsi que l'efficacité des commandes en présence de perturbations sur la température d'entrée des réactants. Nous proposons ensuite la résolution du problème de commande en utilisant la disponibilité réduite comme fonction de Lyapunov. Cette nouvelle fonction permet d'obtenir des lois qui stabilisent asymptotiquement et globalement le système et dont les performances sont bien meilleures qu'avec la disponibilité thermodynamique en terme de temps de réponse et d'amplitude de la commande. Nous proposons aussi deux stratégies de commande qui tiennent compte des contraintes d'actionnement au niveau de la double enveloppe. La première loi de commande est donnée par une moyennisation par morceaux d'une commande distribuée. La seconde loi est entièrement synthétisée à partir de la disponibilité réduite avec la contrainte que la température de la double enveloppe est uniforme le long du réacteur.

Le chapitre 4 est consacré à la formulation hamiltonienne des systèmes thermodynamiques. La structure de Stokes-Dirac est obtenue en étendant les vecteurs de variables de flux et d'effort. Dans une première section nous illustrons cette démarche sur l'exemple académique de la ligne de transmission pour laquelle nous considérons le domaine thermique qui n'est généralement pas représenté. Ce couplage avec le domaine thermique est donné par la relation de dissipation par effet Joule. Les deux premiers principes de la thermodynamique découlent naturellement de cette représentation. Dans la section suivante nous reprenons la méthodologie pour les équations d'un procédé tubulaire de type réaction-diffusion en vision énergétique et entropique. Nous montrons dans les deux cas qu'en utilisant une extension des couples de variables effort-flux thermodynamiques classiques nous obtenons une structure de Stokes-Dirac. Cette extension comprend deux groupes de variables :

- les variables de port correspondant au phénomène de dissipation,
- les variables de port correspondant à l'énergie source apparaissant dans le domaine thermique suite à l'irréversibilité des phénomènes de dissipation,

Enfin nous donnons quelques résultats aboutissant à une représentation pseudo hamiltonienne pour laquelle les matrices de structure dépendent des variables d'effort.

Le chapitre 5 concerne la paramétrisation de l'ensemble des conditions aux frontières qui peuvent être utilisées comme variables de commande pour le réacteur tubulaire tout en assurant l'existence des solutions pour le modèle isotherme. Nous présentons différentes paramétrisations pour le cas isotherme et nous abordons aussi le cas du modèle non isotherme linéarisé.

Le document se termine par une conclusion et quelques perspectives concernant les travaux de cette thèse.

En annexe, nous fournissons les transparents de la soutenance de thèse qui reprennent une partie des travaux présentés dans le manuscrit.

Les principales contributions par chapitre

- Chapitre 1 : les représentations du réacteur tubulaire sous forme entropique et énergétique.
- Chapitre 2 : une présentation exhaustive de la fonction de disponibilité et de ses propriétés.
- Chapitre 3 : cinq lois de commande stabilisantes basées sur la disponibilité et la disponibilité réduite pour le réacteur tubulaire.
- Chapitre 4 : l'obtention de structures de Stokes-Dirac pour le modèle réaction-diffusion en vision énergétique et entropique et aussi pour la ligne de transmission.
- Chapitre 5 : la paramétrisation de l'ensemble des variables frontières qui permettent d'assurer l'existence de solution pour un modèle de réacteur tubulaire linéarisé en vision isotherme.

Chapitre 1

Représentation thermodynamique du réacteur tubulaire

1.1 Introduction

La modélisation du réacteur tubulaire est basée sur l'écriture des différents bilans à savoir les bilans de matière par espèce de réactif, le bilan d'énergie et d'entropie dans le cas où aucun phénomène mécanique ne devient prédominant [72][85]. Une fois les bilans écrits, le modèle représentant le réacteur tubulaire inclut soit le bilan de matière par espèce et celui d'énergie, ce qui donne un modèle dit en *représentation entropique* dans lequel le bilan d'entropie est implicitement vérifié. Ou bien le modèle inclut le bilan de matière par espèce et celui de l'entropie, ce qui donne un modèle dit en *représentation énergétique* dans lequel le bilan d'énergie est implicitement vérifié.

La représentation couramment utilisée pour la modélisation du réacteur tubulaire est la représentation entropique avec des hypothèses simplificatrices telles que l'utilisation d'une capacité calorifique globale constante et une enthalpie de réaction constante [14, 23, 4]. La représentation proposée, avec aucune hypothèse simplificatrice, nous permet de définir des fonctions thermodynamiques basées sur l'entropie qui serviront à la synthèse de loi de commande et de définir une représentation hamiltonienne à port. La représentation énergétique n'est pas couramment utilisée dans la littérature pour la commande des réacteurs tubulaires. Nous l'utilisons dans cette thèse pour définir une représentation hamiltonienne à port.

1.1.1 Organisation du chapitre

L'objectif de ce chapitre est de présenter la démarche de modélisation du réacteur chimique tubulaire. Le chapitre est organisé comme suit : Dans la section 1.2, nous rappelons les fondements thermodynamiques de la modélisation du réacteur : les deux premiers principes de la thermodynamique puis l'hypothèse d'équilibre local basée sur l'équation de Gibbs pour les systèmes hors équilibre.

Dans la section 1.3, nous présentons les lois constitutives des différents phénomènes considérés. Nous présentons ensuite l'ensemble des équations de bilans. Dans la section 1.4, en combinant des différents bilans avec l'hypothèse d'équilibre local, nous fournissons l'expression de la production irréversible d'entropie.

Nous présentons respectivement en section 1.5 et 1.6 la représentation entropique et énergétique du réacteur chimique tubulaire.

Nous discutons les conditions aux frontières et les modèles d'interface dans la section 1.7. Enfin des résultats de simulation du réacteur en boucle ouverte seront présentés en section 1.8.

1.1.2 Mes contributions

La contribution principale de ce chapitre est la formulation d'un modèle dynamique 1D du réacteur chimique tubulaire dans la représentation entropique puis énergétique. Dans ce modèle nous considérons les phénomènes suivants : la réaction, la dispersion et la convection avec des relations constitutives fortement non linéaires.

Nous montrons aussi que sous nos hypothèses de travail, les variables intensives peuvent s'exprimer du point de vue thermodynamique à partir des variables locales. A notre connaissance ce dernier résultat bien qu'implicitement appliqué est rarement démontré dans la littérature. De ce résultat nous en déduisons une égalité concernant l'équation de Gibbs Duhem.

Finalement nous proposons un modèle d'interface en entrée et en sortie du réacteur qui permet de calculer la production irréversible d'entropie à partir de certaines hypothèses sur les variables aux frontières choisies. Ces hypothèses correspondent à des relations de continuité de flux de type Danckwert qui sont très utilisées en génie des procédés [28].

1.2 Les fondements thermodynamiques de la modélisation du réacteur

Dans cette section nous rappelons les fondements thermodynamiques de la modélisation du réacteur tubulaire. Ces fondements sont largement renseignés dans la littérature. Le lecteur pourra trouver une présentation détaillée dans l'ouvrage de H. Callen [24].

1.2.1 La thermodynamique à l'équilibre

Nous pouvons définir l'équilibre thermodynamique comme étant l'état que tout système isolé atteint après un temps suffisamment long, et qui est caractérisé macroscopiquement par un nombre fini de variables d'état.

La thermodynamique à l'équilibre est construite à partir des postulats fondamentaux suivants [24] :

Postulat 1.1. *Les états d'équilibre d'un système simple* sont complètement caractérisés macroscopiquement par son énergie interne U , son volume V , et les nombres de moles N_1, N_2, \dots, N_n de ses n constituants chimiques*

Ce postulat caractérise les variables dites extensives, fonctions homogènes de degré 1, sur lesquelles les bilans sont écrits et qui sont en même temps les variables d'état du système.

Postulat 1.2. *Il existe une fonction des grandeurs extensives définie pour tous les états d'équilibre appelée entropie et notée S et qui possède les propriétés suivantes :*

- Dans un système isolé, les valeurs prises par les grandeurs extensives sont celles qui maximisent l'entropie sur l'ensemble des états d'équilibres.
- L'entropie S est une fonction des variables extensives $U, V, N_1, N_2, \dots, N_n$.
- S est une fonction homogène de degré 1 en ces variables :

$$S(\lambda U, \lambda V, \lambda N_1, \lambda N_2, \dots, \lambda N_n) = \lambda S(U, V, N_1, N_2, \dots, N_n), \forall \lambda \in \mathbb{R}^n \quad (1.2.1)$$

- S est une fonction monotone strictement croissante de l'énergie interne U . Par conséquent, l'inégalité stricte suivante est obtenue :

$$\frac{\partial S}{\partial U} > 0 \quad (1.2.2)$$

L'entropie est donc une variable sur laquelle un bilan s'écrit.

Postulat 1.3. *L'entropie s'annule dès que l'état thermodynamique est tel que :*

$$\frac{\partial U}{\partial S} = 0 \quad (1.2.3)$$

Grâce à la propriété (1.2.2) nous pouvons alternativement écrire :

$$U = U(S, V, N_1, N_2, \dots, N_n) \quad (1.2.4)$$

Nous en déduisons la forme différentielle de cette équation :

$$dU = \left(\frac{\partial U}{\partial S} \right)_{V, N_1, \dots, N_n} dS + \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_{S, N_1, \dots, N_n} dV + \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial U}{\partial N_i} \right)_{S, V, \dots, N_n} dN_i \quad (1.2.5)$$

Ces dérivées partielles des variables extensives définissent les **variables intensives**, fonctions homogènes de degré 0 [24] ; elles sont notées communément :

$$T = \left(\frac{\partial U}{\partial S} \right)_{V, N_1, \dots, N_n}, \quad \text{la température} \quad (1.2.6)$$

$$p = - \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_{S, N_1, \dots, N_n}, \quad \text{la pression} \quad (1.2.7)$$

$$\mu_i = \left(\frac{\partial U}{\partial N_i} \right)_{S, V, \dots, N_k, \dots}, \quad \text{le potentiel chimique du constituant } i \quad (1.2.8)$$

*. Un système simple est par définition homogène, isotrope, non chargé, suffisamment grand pour pouvoir négliger les effets de bord, et non soumis à des champs (électrique, magnétique ou gravitationnel) [24]

Avec les notations ci-dessus , l'équation (1.2.5) devient :

$$dU = TdS - pdV + \sum_1^n \mu_i dN_i \quad (1.2.9)$$

La propriété (1.2.2) est finalement équivalente à la positivité de la température ($T > 0$) et le postulat 1.3 définit une origine pour la température ($T = 0$) à laquelle l'entropie est nulle.

L'équation (1.2.9) est appelée **équation de Gibbs en représentation énergétique**. Dans cette représentation, l'énergie interne U joue le rôle de la fonction implicite et toutes les autres grandeurs extensives jouent le rôle de variables d'état indépendantes. Cette relation fondamentale de la thermodynamique relie les variables extensives aux variables intensives.

Nous écrivons l'équation de Gibbs (1.2.9) sous la forme compacte suivante :

$$dU = w^T dZ \quad (1.2.10)$$

avec

$$Z = \begin{pmatrix} S & V & N_1 & \dots & N_n \end{pmatrix}^T \quad (1.2.11)$$

le vecteur des variables extensives et

$$w = \begin{pmatrix} T & -p & \mu_1 & \dots & \mu_n \end{pmatrix}^T \quad (1.2.12)$$

le vecteur des variables intensives.

U étant une fonction homogène de degré 1 par rapport aux variables extensives Z , nous pouvons alors réécrire explicitement l'expression de l'énergie en utilisant le théorème d'Euler [24] :

$$U = w^T Z \quad (1.2.13)$$

Enfin, à partir de l'expression de l'énergie (1.2.13) et de l'équation de Gibbs (1.2.9) nous déduisons la relation dite de Gibbs-Duhem :

$$dw^T Z = 0 \quad (1.2.14)$$

En **représentation entropique**, l'entropie S joue le rôle de fonction implicite et toutes les autres grandeurs extensives jouent le rôle de variables d'état.

A partir de l'équation (1.2.9) , nous pouvons écrire l'équation de Gibbs en représentation entropique :

$$dS = \frac{1}{T}dU + \frac{p}{T}dV - \sum_1^n \frac{\mu_i}{T}dN_i \quad (1.2.15)$$

Dans cette représentation, les vecteurs Z et w correspondent aux variables suivantes :

$$\begin{aligned} w &= \left(\frac{1}{T} \quad \frac{p}{T} \quad -\frac{\mu_1}{T} \quad \dots \quad -\frac{\mu_n}{T} \right)^T \\ Z &= \left(U \quad V \quad N_1 \quad \dots \quad N_n \right)^T \end{aligned}$$

et sous forme compacte (1.2.15) s'écrit :

$$dS = w^T dZ \quad (1.2.16)$$

S étant une fonction homogène de degré 1 des variables extensives Z , nous obtenons :

$$S = w^T Z \quad (1.2.17)$$

ainsi que la relation de Gibbs-Duhem en représentation entropique :

$$dw^T Z = 0 \quad (1.2.18)$$

Remarque 1.1. Nous obtenons en particulier : $\frac{\partial w^T}{\partial Z} Z = 0$.

En effet en partant de la relation (1.2.17) et en la dérivant par rapport à Z nous obtenons :

$$\frac{\partial S}{\partial Z} = \frac{\partial w^T}{\partial Z} Z + w$$

Or

$$\frac{\partial S}{\partial Z} = w$$

Nous en déduisons le résultat.

Remarque 1.2. Tout le raisonnement précédent aurait pu être fait en considérant

$$U = U(S, V, m_1, m_2, \dots, m_n) \quad (1.2.19)$$

avec m_i la masse du constituant i dans le mélange

Nous en déduisons la forme différentielle de l'équation de Gibbs :

$$dU = TdS - pdV + \sum_{i=1}^n \mu_i dm_i \quad (1.2.20)$$

avec μ_i en J/kg .

1.2.2 Les deux premiers principes

Le premier principe de la thermodynamique stipule que l'énergie totale est conservée. Dans un système à plusieurs domaines d'énergie (mécanique, électrique, thermique, chimique...) l'énergie peut passer d'un domaine à l'autre tout en conservant l'énergie totale du système. Par exemple dans le cas d'un système thermodynamique fermé sans réaction, il s'énonce de la manière suivante :

Au cours d'une transformation quelconque d'un système fermé, la variation de son énergie est égale à la quantité d'énergie échangée avec le milieu extérieur, sous forme d'énergie thermique et de travail.

Le deuxième principe de la thermodynamique établit l'irréversibilité des phénomènes physiques par le biais de la fonction entropie. Dans un système à plusieurs domaines d'énergie incluant le domaine thermique, certaines transformations ne sont possibles que partiellement. L'autre partie de l'énergie part de manière irréversible dans le domaine thermique et ne pourra jamais revenir dans le domaine énergétique de départ. Ce principe implique une production irréversible d'entropie.

1.2.3 Le principe du minimum d'énergie à l'équilibre thermodynamique

Dans cette section nous allons relier les deux principes de la thermodynamique avec les postulats présentés en début de ce chapitre.

De par le premier point du postulat 2 nous obtenons le **principe du maximum d'entropie** [24] : Nous avons vu que l'état d'équilibre stable est caractérisé par une entropie maximale.

L'état d'équilibre stable est donc caractérisé par les relations suivantes en représentation entropique :

$$\left(\frac{\partial S}{\partial Z}\right) = 0 \quad (1.2.21)$$

$$\left(\frac{\partial^2 S}{\partial Z^2}\right) \leq 0 \quad (1.2.22)$$

La relation (1.2.22) montre que l'entropie est concave par rapport aux variables extensives Z .

Nous en déduisons le **principe du minimum d'énergie** : l'état d'équilibre stable est caractérisé par une énergie minimale.

En effet il est facile de montrer à partir de la fonction $\Psi(S, U, X) = S - S(U, X) = 0$ avec $Z = (U, X)^T$ où dans cette expression S représente la variable d'état et $S(U, X)$ la fonction thermodynamique dépendant de U et X . En prenant la différentielle totale de Ψ et en remplaçant dU par l'équation de Gibbs :

$$dU = \left(\frac{\partial U}{\partial X}\right) dX + \left(\frac{\partial U}{\partial S}\right) dS \quad (1.2.23)$$

on obtient :

$$\left(\frac{\partial U}{\partial X}\right) = -\frac{\left(\frac{\partial S}{\partial X}\right)}{\left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)} \quad (1.2.24)$$

En redérivant cette expression par rapport à X , nous obtenons :

$$\left(\frac{\partial^2 U}{\partial X^2}\right) = -\frac{\left(\frac{\partial^2 S}{\partial X^2}\right)}{\left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)} + \left(\frac{\partial S}{\partial X}\right) \frac{\left(\frac{\partial^2 S}{\partial X \partial U}\right)}{\left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)^2} \quad (1.2.25)$$

A l'équilibre thermodynamique en utilisant les relations suivantes (1.2.21) et (1.2.22) nous déduisons :

$$\left(\frac{\partial U}{\partial Z}\right) = 0 \quad (1.2.26)$$

$$\left(\frac{\partial^2 U}{\partial Z^2}\right) \geq 0 \quad (1.2.27)$$

puisque $\frac{\partial S}{\partial U} = T > 0$.

La relation (1.2.27) montre que l'énergie est convexe par rapport aux variables extensives Z et que l'équilibre thermodynamique est celui qui minimise l'énergie U par rapport à Z .

1.2.4 L'hypothèse d'équilibre local pour les systèmes hors équilibre

La thermodynamique des processus traite des systèmes supposés à l'équilibre thermodynamique à chaque instant. Cette hypothèse est loin d'être vérifiée pour les systèmes réels dans lesquels il existe le plus souvent un déséquilibre thermodynamique soit à l'intérieur du système ou bien entre le système et son environnement extérieur. Malgré ce déséquilibre thermodynamique, l'hypothèse dite d'équilibre local est toutefois admise :

Cette hypothèse fondamentale pour la thermodynamique irréversible consiste à considérer que les relations locales et instantanées d'un système physique sont les mêmes que celles d'un système à l'équilibre thermodynamique.

Cette hypothèse implique :

- Toutes les variables locales définies en thermodynamique à l'équilibre garde un sens.
- Toutes les relations établies en thermodynamique à l'équilibre restent valides

Ainsi nous avons en dimension finie pour l'équation de Gibbs :

$$\frac{dU}{dt} = T \frac{dS}{dt} - p \frac{dV}{dt} + \sum_1^n \mu_i \frac{dm_i}{dt} \quad (1.2.28)$$

avec les mêmes définitions des variables intensives que celles données dans le postulat 1.3.

En dimension infinie cette hypothèse consiste à considérer que localement (échelle mésoscopique) les relations entre les variables locales (exprimées par unité de masse) tendent vers les grandeurs spécifiques (issues de thermodynamique à l'équilibre). On peut l'énoncer comme [70] :

Pour tout $\epsilon > 0$, il existe $\delta > 0$, telle que si le volume local V est tel que $V < \delta$, alors $\|\hat{z}(x, t) - \hat{Z}(x, t)\| < \epsilon$,

avec \hat{Z} représente les grandeurs spécifiques, $\hat{z}(x, t)$ les variables locales (par unité de masse) et x la coordonnée spatiale en 1D.

Les variables intensives sont définies comme :

$$w = \frac{\partial \hat{s}}{\partial \hat{z}} \quad (1.2.29)$$

L'hypothèse d'équilibre local qui implique l'équation de Gibbs est applicable aux quantités élémentaires de matière. En présence de phénomène de transport, notamment la convection, pour que l'équation de Gibbs reste vérifiée il faut suivre la matière dans son mouvement moyen (défini par la vitesse de convection v). Ceci implique dans le cas 1D que la différentielle dans l'équation de Gibbs prend le sens d'une dérivée matérielle ($\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x}$) lorsqu'on écrit la dynamique temporelle des variables extensives :

$$\frac{D\hat{u}}{Dt} = w^T \frac{D\hat{z}}{Dt} \quad (1.2.30)$$

Ainsi l'intérêt principal de l'hypothèse d'équilibre local, c'est que nous pouvons utiliser, lorsque le volume est infinitésimal, les variables locales $\hat{z}(x, t)$ pour caractériser l'état thermodynamique du système.

Il faut noter que le vecteur $\hat{z}(x, t)$ n'est plus un vecteur de variables extensives ou homogènes de degré 1. Ces composantes sont des variables homogènes de degré 0 ou tout simplement des fonctions. Les quantités extensives locales peuvent être écrites comme $\hat{z}(x, t)dm$ où dm représente la masse élémentaire. Sachant que $dm = \rho dV$ avec dV le volume élémentaire et ρ la masse volumique du mélange considéré, les variables extensives peuvent être écrites comme $\rho\hat{z}(x, t)dV = z(x, t)dV$. $z(x, t) = \rho\hat{z}(x, t)$ représentent dans ce cas des quantités par unité de volume.

A partir de l'hypothèse d'équilibre local appliquée à un volume suffisamment petit V , l'énergie totale U de ce volume s'écrit :

$$U = u(x, t)V = Ts(x, t)V - p(x, t)V + \sum_1^n \mu_i \rho_i(x, t)V \quad (1.2.31)$$

où $\rho_i(x, t)$ représente la concentration massique par espèce. En partant de l'équation de Gibbs écrite sur les quantités extensives totales dans le volume V nous déduisons l'équation de Gibbs en dimension infinie :

$$\begin{aligned} dU &= [TdS - pdV + \sum_1^n \mu_i dM_i] \\ d(u(x, t)V) &= [Td(s(x, t)V) - pdV + \sum_1^n \mu_i d(\rho_i(x, t)V)] \end{aligned} \quad (1.2.32)$$

En développant la différentielle nous obtenons :

$$Vdu + \underbrace{\left[u - Ts + p - \sum_1^n \mu_i \rho_i \right]}_{=0} dV = V[Tds(x, t) + \sum_1^n \mu_i d\rho_i(x, t)] \quad (1.2.33)$$

A partir des équations (1.2.31) et (1.2.33) nous déduisons finalement l'équation de Gibbs

en dimension infinie :

$$\begin{aligned} du(x, t) &= Tds(x, t) + \sum_1^n \mu_i d\rho_i(x, t) \\ &= w^T dz(x, t) \end{aligned} \quad (1.2.34)$$

avec $w = \begin{pmatrix} T & \mu_1 & \dots & \mu_n \end{pmatrix}^T$ et $z(x, t) = \begin{pmatrix} s(x, t) & \rho_1(x, t) & \dots & \rho_n(x, t) \end{pmatrix}^T$ et

$$u = w^T z \quad (1.2.35)$$

Nous avons aussi :

$$\frac{Du}{Dt} = w^T \frac{Dz}{Dt} \quad (1.2.36)$$

Nous pouvons aussi écrire cette équation de Gibbs en représentation entropique comme suit :

$$ds = w^T dz \quad (1.2.37)$$

Avec $w = \begin{pmatrix} \frac{1}{T} & -\frac{\mu_1}{T} & \dots & -\frac{\mu_n}{T} \end{pmatrix}^T$ et $z(x, t) = \begin{pmatrix} u(x, t) & \rho_1(x, t) & \dots & \rho_n(x, t) \end{pmatrix}^T$ et

$$s = w^T z \quad (1.2.38)$$

Ainsi nous obtenons :

$$\frac{Ds}{Dt} = w^T \frac{Dz}{Dt} \quad (1.2.39)$$

1.2.5 Cas des systèmes à pression constante

Lorsque la pression P est supposée constante, nous utilisons une autre variable d'état appelée l'enthalpie qui est notée h donnée par :

$$H = h(x, t)V = U + pV = (u + p)V \quad (1.2.40)$$

D'où $h(x, t) = u(x, t) + p(x, t)$ est la densité volumique de l'enthalpie. Ainsi, l'équation de Gibbs peut être réécrite en fonction de $h(x, t)$:

$$\begin{aligned} dh(x, t) &= Tds(x, t) + \sum_1^n \mu_i d\rho_i(x, t) \\ &= w^T dz(x, t) \end{aligned} \quad (1.2.41)$$

Avec $w = \begin{pmatrix} T & \mu_1 & \dots & \mu_n \end{pmatrix}^T$ et $z(x, t) = \begin{pmatrix} s(x, t) & \rho_1(x, t) & \dots & \rho_n(x, t) \end{pmatrix}^T$

Nous pouvons aussi écrire l'enthalpie en fonction de $s(x, t)$ et $\rho_i(x, t)$ comme suit :

$$h(x, t) = Ts(x, t) + \sum_1^n \mu_i \rho_i(x, t) \quad (1.2.42)$$

Nous obtenons encore :

$$\frac{Dh}{Dt} = w^T \frac{Dz}{Dt} \quad (1.2.43)$$

En vision entropique nous obtenons de manière équivalente

$$\begin{aligned} ds(x, t) &= \frac{1}{T} dh(x, t) - \sum_1^n \frac{\mu_i}{T} d\rho_i(x, t) \\ &= w^T dz(x, t) \end{aligned} \quad (1.2.44)$$

avec $w = \left(\frac{1}{T} \quad -\frac{\mu_1}{T} \quad \dots \quad -\frac{\mu_n}{T} \right)^T$ et $z(x, t) = \left(h(x, t) \quad \rho_1(x, t) \quad \dots \quad \rho_n(x, t) \right)^T$
ainsi que

$$\frac{Ds}{Dt} = w^T \frac{Dz}{Dt} \quad (1.2.45)$$

1.2.6 L'équation de Gibbs Duhem

Dans le cas d'une représentation entropique l'équation de Gibbs aboutit à :

$$\frac{Ds}{Dt} = w^T \frac{Dz}{Dt} \quad (1.2.46)$$

soit

$$\frac{\partial s}{\partial t} + v \frac{\partial s}{\partial x} = w^T \frac{\partial z}{\partial t} + w^T v \frac{\partial z}{\partial x} \quad (1.2.47)$$

A partir de (1.2.47) , l'équation de Gibbs-Duhem en dimension infinie s'écrit :

$$\frac{D}{Dt}(s - w^T z) = -\frac{Dw^T}{Dt} z = 0 \quad (1.2.48)$$

Cette relation peut s'affiner sous certaines hypothèses. En particulier le terme $\frac{\partial w}{\partial x} z$ peut s'annuler sous certaines hypothèses. Nous allons effectuer cette étude dans le cas où la pression est constante et en représentation entropique.

Dans ce cas nous avons

$$dS = \frac{dH}{T} - \frac{V}{T} \overbrace{dP}^{=0} - \sum_i \frac{\mu_i}{T} dM_i \quad (1.2.49)$$

Pour l'instant les variables intensives ont été définies à partir des variables extensives définies sur une masse élémentaire comme :

$$w = \frac{\partial S}{\partial Z} = \frac{\partial \hat{s}M}{\partial \hat{z}M} \quad (1.2.50)$$

avec $w = \left(\frac{1}{T} \quad -\frac{\mu_1}{T} \quad \dots \quad -\frac{\mu_n}{T} \right)^T$ et $Z(x, t) = \left(H \quad M_1(x, t) \quad \dots \quad M_n(x, t) \right)^T$.

Il faut trouver le lien entre les variables intensives w et les dérivées partielles $\frac{\partial s}{\partial z}$.

Nous avons :

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial H} = \frac{\partial(sV)}{\partial(hV)} = \frac{\partial(sV)}{\partial h} \frac{\partial h}{\partial(Vh)} \quad (1.2.51)$$

$$= \left(s \frac{\partial V}{\partial h} + V \frac{\partial s}{\partial h} \right) \left(\frac{\partial V}{\partial h} + V \right)^{-1} \quad (1.2.52)$$

Nous constatons à partir de cette relation que si aucune hypothèse particulière n'est faite, il n'y a pas identité entre la variable intensive $\frac{\partial S}{\partial H}$ et la dérivée partielle $\frac{\partial s}{\partial h}$ puisque V n'est pas une variable indépendante.

Cependant dans le cas où le volume massique reste constant, nous obtenons :

$$\frac{\partial S}{\partial H} = \frac{\partial s}{\partial h} \quad (1.2.53)$$

ainsi que

$$\frac{\partial S}{\partial M_i} = \frac{\partial s}{\partial \rho_i} \quad (1.2.54)$$

A partir de la remarque 1.1 ($\frac{\partial w^T}{\partial Z} Z = 0$), nous déduisons l'équation de Gibbs-Duhem dans le cas où p et ρ sont constants :

$$\frac{\partial w^T}{\partial x} z = 0 \quad (1.2.55)$$

En effet

$$\begin{aligned} \frac{\partial w^T}{\partial x} z &= \left(\frac{\partial w}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial x} \right)^T z \\ &= \frac{\partial z^T}{\partial x} \frac{\partial w^T}{\partial z} z = 0 \end{aligned} \quad (1.2.56)$$

1.3 Les hypothèses de modélisation

Ci-dessous, nous donnons les hypothèses utilisées pour écrire le modèle du réacteur chimique tubulaire.

1. Le réacteur tubulaire est siège d'un phénomène de convection, d'une réaction chimique r , de phénomènes de dispersion de la matière et de la chaleur.
2. Nous considérons une symétrie axiale au niveau du réacteur pour les variables d'état ; seul l'axe longitudinal de coordonnée x est pris en considération.
3. La masse volumique totale ρ est constante.
4. La vitesse de convection v est constante. La vitesse d'alimentation du réacteur est identique à celle de la convection.
5. On considère un mélange idéal.
6. La viscosité du mélange est négligée.
7. L'échange de chaleur distribué avec la double enveloppe est caractérisée par une équation du type $q(x, t) = C(T_j(x, t) - T(x, t))$ où $T_j(x, t)$ est la température de la double enveloppe.

8. Les capacités thermiques spécifiques c_{pA} et c_{pB} sont constantes.

Les différents phénomènes considérés sont présentés dans les sections suivantes.

1.3.1 La convection

Le flux convectif massique de l'espèce i , noté F_{conv}^i , de vitesse v est donné par :

$$F_{conv}^i = v\rho_i \quad (1.3.1)$$

où ρ_i est la concentration massique de l'espèce i . La vitesse de convection v est supposée constante et égale à la vitesse d'alimentation.

Le flux convectif en l'enthalpie est induit par la convection de la matière. Il s'écrit comme suit pour une solution à n composants :

$$F_{conv}^h = \sum_1^n F_{conv}^i h_i \quad (1.3.2)$$

avec h_i l'enthalpie spécifique de l'espèce i . De la même manière le flux convectif de l'entropie est induit par la convection de la matière. Il s'écrit comme suit :

$$F_{conv}^s = \sum_1^n F_{conv}^i s_i \quad (1.3.3)$$

Avec s_i l'entropie spécifique de l'espèce i .

1.3.2 La dispersion

Le phénomène de dispersion 1D qui s'applique dans le cas d'un faible écart à l'écoulement piston, repose sur la superposition d'un écoulement piston convectif de vitesse v et d'une diffusion aléatoire obéissant formellement à une loi constitutive (comme la loi de Fick). Ce phénomène correspond à une diffusion moléculaire à laquelle vient s'ajouter la projection de phénomènes hydrodynamiques relatifs aux autres dimensions (Voir [77] [78] [85] [13]).

Le flux dispersif massique par espèce i , provenant d'une dispersion axiale, est décrit par la loi de Fick :

$$F_{dis}^i = -D\rho \frac{\partial \theta_i}{\partial x} \quad (1.3.4)$$

avec $\theta_i = \frac{\rho_i}{\rho}$ la fraction massique et D le coefficient de diffusion supposé constant.

L'intérêt de l'utilisation de cette loi est que la somme totale des flux dispersifs est nulle et donc n'engendre pas de convection : $\sum_{i=1}^n F_{dis}^i = \sum_{i=1}^n -D\rho \frac{d\theta_i}{dx} = 0$.

Le flux dispersif d'enthalpie et d'entropie sont induits par la dispersion de la matière. Ils s'écrivent comme suit :

$$F_{dis}^h = \sum_{i=1}^n F_{dis}^i h_i \quad (1.3.5)$$

$$F_{dis}^s = \sum_{i=1}^n F_{dis}^i s_i \quad (1.3.6)$$

1.3.3 La dispersion thermique

Le flux de dispersion thermique noté F_{cond}^h est donné par :

$$F_{cond}^h = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \quad (1.3.7)$$

avec λ le coefficient de dispersion supposé constant. Le flux de dispersion d'entropie est quand à lui induit par le flux de dispersion thermique. Il s'écrit comme suit :

$$F_{cond}^s = \frac{1}{T} F_{cond}^h \quad (1.3.8)$$

1.3.4 La réaction chimique

Nous considérons une réaction du premier ordre de type : $\nu_A A \rightarrow \nu_B B$ où ν_A et ν_B sont les coefficients stœchiométriques de la réaction. La cinétique de réaction, notée r , est modélisée par la loi d'Arrhenius [21] :

$$r = k_0 e^{-\frac{E}{RT}} \rho \frac{\theta_A}{M_A} \quad (1.3.9)$$

Avec :

- k_0 la constante cinétique
- E l'énergie d'activation
- R la constante des gaz parfaits
- T la température au sein du réacteur
- θ_a la fraction massique de l'espèce A
- M_A la masse molaire de l'espèce A

1.4 Le modèle du réacteur tubulaire

Dans cette section, nous allons écrire les différents bilans nécessaires afin d'établir le modèle du réacteur tubulaire dans la représentation entropique et énergétique.

1.4.1 Les bilans de matière

Le bilan par espèce i (pour $i = A, B$) s'écrit :

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} (F_{conv}^i + F_{dis}^i) + M_i \nu_i^s r \quad (1.4.1)$$

Où M_i , ν_i^s sont respectivement la masse molaire de l'espèce i et le coefficient stœchiométrique signée de l'espèce i . En considérant la fraction massique $\theta_i = \frac{\rho_i}{\rho}$ et l'équation (1.4.1) et avec les hypothèses que ρ et v sont constants et uniformes le long du réacteur, nous obtenons

les égalités suivantes :

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = \frac{\partial \rho}{\partial t} \theta_i + \frac{\partial \theta_i}{\partial t} \rho = \overbrace{-\rho v \frac{\partial \theta_i}{\partial x} - \theta_i \frac{\partial}{\partial x}(\rho v)}^{-\frac{\partial}{\partial x} F_{conv}^i} - \frac{\partial}{\partial x} F_{dis}^i + M_i \nu_i^s r \quad (1.4.2)$$

$$\rho \frac{\partial \theta_i}{\partial t} + \rho v \frac{\partial \theta_i}{\partial x} = -\theta_i \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v) \right) - \frac{\partial}{\partial x} F_{dis}^i + M_i \nu_i^s r \quad (1.4.3)$$

$$\rho \frac{D\theta_i}{Dt} = -\frac{\partial}{\partial x} F_{dis}^i + M_i \nu_i^s r \quad (1.4.4)$$

l'expression finale du bilan de matière par espèce devient

$$\rho \frac{D\theta_i}{Dt} = -\frac{\partial}{\partial x} F_{dis}^i + M_i \nu_i^s r \quad (1.4.5)$$

1.4.2 Le bilan d'énergie

Compte tenu des hypothèses, l'énergie totale correspond à l'énergie interne. Comme nous supposons la pression constante ce bilan est égal au bilan d'enthalpie. Nous avons :

$$\frac{\partial}{\partial t} h = -\frac{\partial}{\partial x} F_{conv}^h - \frac{\partial}{\partial x} F_{dis}^h - \frac{\partial}{\partial x} F_{cond}^h + q(x, t) \quad (1.4.6)$$

Par le même calcul utilisé pour les bilans de matière par espèce (1.4.5), le bilan d'énergie totale en dimension infinie peut s'écrire comme suit :

$$\frac{Dh}{Dt} = q(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} F_{dis}^h - \frac{\partial}{\partial x} F_{cond}^h \quad (1.4.7)$$

1.4.3 Le bilan d'entropie

Le bilan local d'entropie est donné par

$$\frac{\partial}{\partial t} s = -\frac{\partial}{\partial x} F_{conv}^s - \frac{\partial}{\partial x} F_{dis}^s - \frac{\partial}{\partial x} F_{cond}^s + \frac{q}{T_j} + \sigma_s \quad (1.4.8)$$

En dérivée matérielle, le bilan d'entropie s'exprime comme :

$$\frac{Ds}{Dt} = -\frac{\partial}{\partial x} F_{dis}^s - \frac{\partial}{\partial x} F_{cond}^s + \frac{q}{T_j} + \sigma_s \quad (1.4.9)$$

1.4.4 La production irréversible d'entropie

Pour calculer la production irréversible d'entropie en dimension infinie, nous combinons l'équation exprimant l'hypothèse d'équilibre local en dimension infinie (1.2.43) et les bilans d'entropie (1.4.8), d'énergie (1.4.6) et de matière par espèce (1.4.5).

$$\sigma_s = q \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_j} \right) - \frac{1}{T} \sum_{i=1}^n \mu_i M_i \nu_i^s r - \frac{1}{T} \sum_{i=1}^n F_{dis}^i \frac{\partial \mu_i}{\partial x} - \frac{1}{T} F_{dis}^s \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{1}{T} F_{cond}^s \frac{\partial T}{\partial x} \quad (1.4.10)$$

où

- $q(\frac{1}{T_j} - \frac{1}{T})$ représente la production d'entropie due au transfert de chaleur par la double enveloppe.
- $-\frac{1}{T} \sum \mu_i M_i \nu_i^s r$ représente la production d'entropie due à la réaction chimique.
- $-\frac{1}{T} \sum F_{dis}^i \frac{\partial \mu_i}{\partial x} - \frac{1}{T} F_{dis}^s \frac{\partial T}{\partial x}$ représente la production d'entropie due à la dispersion. Le premier terme de la somme représente la contribution matérielle et le second la contribution thermique à la production irréversible d'entropie..
- $-\frac{1}{T} F_{cond}^s \frac{\partial T}{\partial x}$ représente la production irréversible d'entropie due à la dispersion thermique.

Vu que $F_{dis}^s = \sum F_{dis}^i s_i$, nous déduisons une autre expression pour la production irréversible d'entropie en fonction des flux d'enthalpie :

$$\sigma_s = q \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_j} \right) + \sum M_i \nu_i^s \left(\frac{-\mu_i}{T} \right) r + \sum F_{dis}^i \frac{\partial(\frac{-\mu_i}{T})}{\partial x} + F_{dis}^h \frac{\partial(\frac{1}{T})}{\partial x} + F_{cond}^h \frac{\partial(\frac{1}{T})}{\partial x} \quad (1.4.11)$$

Remarque 1.3. Le terme de production irréversible d'entropie est donné respectivement sous forme énergétique (1.4.10) et sous forme entropique (1.4.11).

1.5 Représentation entropique du réacteur tubulaire

Dans la représentation dite entropique, l'entropie s est considérée comme étant une fonction implicite et toutes les autres grandeurs (h, ρ_A, ρ_B) sont les variables d'état. Ainsi cette représentation inclut le bilan d'énergie (1.4.6) et les bilans de matière par espèce (1.4.1).

Le modèle du réacteur chimique tubulaire en représentation entropique est donnée par le bilan d'enthalpie et le bilan de matière par espèce :

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\frac{\partial F_{conv}^h}{\partial x} - \frac{\partial F_{cond}^h}{\partial x} - \frac{\partial F_{dis}^h}{\partial x} + q \quad (1.5.1)$$

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = -\frac{\partial F_{conv}^A}{\partial x} - \frac{\partial F_{dis}^A}{\partial x} - \nu_A r \quad (1.5.2)$$

$$\frac{\partial \rho_B}{\partial t} = -\frac{\partial F_{conv}^B}{\partial x} - \frac{\partial F_{dis}^B}{\partial x} + \nu_B r \quad (1.5.3)$$

Nous avons choisi ici de prendre tous les coefficients stoechiométriques positifs. En considérant les expressions des différents flux, nous pouvons écrire le modèle sous forme matricielle :

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} h(x, t) \\ \rho_A(x, t) \\ \rho_B(x, t) \end{pmatrix} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[\begin{pmatrix} v & 0 & 0 \\ 0 & v & 0 \\ 0 & 0 & v \end{pmatrix} - D \begin{pmatrix} 0 & h_A(x, t) & h_B(x, t) \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \right] \begin{pmatrix} h(x, t) \\ \rho_A(x, t) \\ \rho_B(x, t) \end{pmatrix} \quad (1.5.4)$$

$$- \frac{\partial}{\partial x} \left[-\lambda \begin{pmatrix} -T^2(x, t) \frac{\partial \frac{1}{T(x, t)}}{\partial x} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right] + \begin{pmatrix} 0 \\ -\nu_A r(x, t) \\ +\nu_B r(x, t) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} CT(x, t) \left(\frac{T_j(x, t)}{T(x, t)} - 1 \right) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

avec $h_i = c_{pi}(T - T_{ref}) + h_{i_{ref}}$, $i = A, B$ qui représente les enthalpies massiques partielles pour un mélange idéal. Le flux de dispersion peut s'exprimer en fonction des variables d'état $\begin{pmatrix} h & \rho_A & \rho_B \end{pmatrix}^T$ en utilisant l'expression suivante pour la température :

$$T = \frac{h - \rho_A(h_{A_{ref}} - c_{pA}T_{ref}) - \rho_B(h_{B_{ref}} - c_{pB}T_{ref})}{c_{pA}\rho_A + c_{pB}\rho_B} \quad (1.5.5)$$

Sous une forme compacte le modèle peut aussi s'écrire comme suit :

$$\frac{\partial z}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}F(z, x, t) + R(z, x, t) + gq(z, x, t) \quad (1.5.6)$$

où $z = \begin{pmatrix} h & \rho_A & \rho_B \end{pmatrix}^T$ est le vecteur de variables d'état formé par les variables locales correspondant à la concentration massique d'enthalpie et les concentrations massiques des deux espèces A et B . F est le vecteur de flux total, comportant la dispersion et la convection. R est le vecteur de la réaction et $g = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}^T$ et q est le vecteur d'échange thermique avec l'extérieur.

Le vecteur du flux total est donné par :

$$F = F_{conv} + F_d \quad (1.5.7)$$

$$F_{conv} = \begin{pmatrix} F_{conv}^h & F_{conv}^A & F_{conv}^B \end{pmatrix}^T = \begin{pmatrix} v h & v \rho_a & v \rho_b \end{pmatrix}^T \quad (1.5.8)$$

$$F_{dis} = \begin{pmatrix} F_{dis}^h & F_{dis}^A & F_{dis}^B \end{pmatrix}^T \quad (1.5.9)$$

$$F_d^h = F_{dis}^h + F_{cond}^h \quad (1.5.10)$$

$$F_d^A = F_{dis}^A \quad (1.5.11)$$

$$F_d^B = F_{dis}^B \quad (1.5.12)$$

Le vecteur de réaction est défini par $R = \begin{pmatrix} 0 & -\nu_{AR} & \nu_{BR} \end{pmatrix}^T$, q représente le flux d'échange de chaleur avec l'extérieur et $g = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}^T$.

1.5.1 Le modèle standard du génie des procédés

L'équation (1.5.1) écrite en fonction de l'enthalpie peut s'exprimer en fonction de la température T en utilisant l'expression des enthalpies massiques partielles et $h = \sum \rho_i h_i$, $i = A, B$. Nous obtenons ainsi l'équation aux dérivées partielles de la température T :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{c_p(x, t)} \left(\left(D_{c_{pA}} \frac{\partial \rho_A}{\partial x} + D_{c_{pB}} \frac{\partial \rho_B}{\partial x} - v c_p(x, t) \right) \frac{\partial T}{\partial x} + \right. \quad (1.5.13)$$

$$\left. \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + (\nu_A h_A(x, t) - \nu_B h_B(x, t)) r(x, t) + C(T_j(x, t) - T) \right) \quad (1.5.14)$$

où $c_p(x, t) = c_{pA}\rho_A + c_{pB}\rho_B$ et $(\nu_A h_A(x, t) - \nu_B h_B(x, t))$ représente l'enthalpie de réaction.

En utilisant l'équation aux dérivées partielles sur la température au lieu de celle sur l'enthalpie on aboutit au modèle largement utilisé dans la littérature pour la synthèse de

commande moyennant quelques hypothèses simplificatrices supplémentaires, en particulier en considérant la capacité calorifique totale c_p et l'enthalpie de réaction constantes [14, 25, 2, 23, 70, 63, 3, 90, 57, 61]. Ce point sera abordé plus en détail dans le chapitre 3.

1.6 Représentation énergétique du réacteur tubulaire

Dans la représentation dite énergétique, l'énergie interne U est considérée comme étant une fonction et toutes les autres grandeurs sont des variables d'état. Ainsi cette représentation inclut le bilan d'entropie (1.4.8) et les bilans de matière par espèce (1.4.1) :

$$\frac{\partial s}{\partial t} = -\frac{\partial F_{conv}^s}{\partial x} - \frac{\partial F_{cond}^s}{\partial x} - \frac{\partial F_d^s}{\partial x} - \frac{q}{T_j} + \sigma_s \quad (1.6.1)$$

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = -\frac{\partial F_{conv}^A}{\partial x} - \frac{\partial F_{dis}^A}{\partial x} - \nu_A r \quad (1.6.2)$$

$$\frac{\partial \rho_B}{\partial t} = -\frac{\partial F_{conv}^B}{\partial x} - \frac{\partial F_{dis}^B}{\partial x} + \nu_B r \quad (1.6.3)$$

La modèle sous forme matricielle est donnée par :

$$\begin{aligned} \partial_t \begin{pmatrix} s \\ \rho_A \\ \rho_B \end{pmatrix} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[\begin{pmatrix} v & 0 & 0 \\ 0 & v & 0 \\ 0 & 0 & v \end{pmatrix} - D \begin{pmatrix} 0 & s_A(x,t) & s_B(x,t) \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \right] \begin{pmatrix} s \\ \rho_A \\ \rho_B \end{pmatrix} \\ (1.6.4) \\ -\frac{\partial}{\partial x} \left[-\lambda \begin{pmatrix} \frac{1}{T(x,t)} \frac{\partial T(x,t)}{\partial x} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right] + \begin{pmatrix} 0 \\ -\nu_A r(x,t) \\ +\nu_B r(x,t) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sigma_s \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} C(1 - \frac{T(x,t)}{T_j(x,t)}) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

1.7 Les modèles d'interface aux frontières et les conditions frontières

Dans cette section nous étudions le modèle d'interface basé sur la continuité des flux de matière par espèce et d'énergie dans un cas général. Nous exprimons en particulier le modèle d'interface en entropie. Ce modèle permet de calculer la production irréversible d'entropie due aux échanges du système avec son environnement extérieur aux bords du réacteur. Nous donnons ensuite les conditions aux frontières. Enfin nous terminons cette section en exprimant le taux de production irréversible d'entropie dans le cas de nos conditions frontière.

1.7.1 Modèle d'interface

Un modèle d'interface est déterminé par deux choix distincts. Le premier consiste à choisir les variables manipulées à la frontière, les variables de port et le deuxième à choisir les conditions opératoires relativement aux variables choisies, les conditions limites.

Nous avons choisi les variables de flux comme variables du port aux frontières.

En général, les variables aux frontières sont choisies comme étant les variables de flux évaluées aux frontières du réacteur. Sur ces variables de flux nous supposons aussi des conditions de continuité de flux entre l'extérieur et l'intérieur du réacteur. Cela nous donne un modèle d'interface basée sur des conditions connues sous le nom de Danckwerts [28] [73].

Dans la suite nous allons utiliser ces conditions de continuité de flux pour établir un modèle d'interface caractérisé par une production irréversible d'entropie :

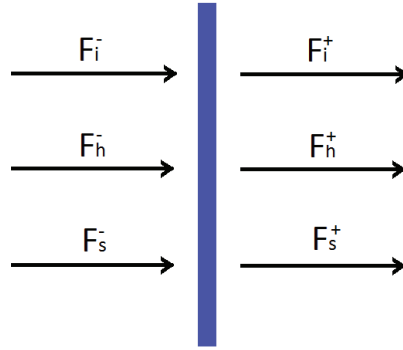


FIGURE 1.7.1 – Les flux en interface

Nous notons par $-$ le coté gauche de l'interface qui correspond à l'extérieur du réacteur et $+$ le coté interne au réacteur. Reprenons les différentes conditions de continuité de flux :

- La continuité de flux de matière par espèce :

$$F_i^- = F_i^+ \quad (1.7.1)$$

où F_i présente le flux total lié à l'espèce i .

- La continuité de flux d'enthalpie :

$$F_h^- = F_h^+ \quad (1.7.2)$$

Nous pouvons par ailleurs écrire le flux d'enthalpie total comme la somme d'un flux induit par la dispersion de matière avec un flux de dispersion thermique :

$$F_h = \sum F_i h_i + \Phi \quad (1.7.3)$$

avec $F_i = (F_{conv}^i + F_{dis}^i)$ et $\Phi = F_{cond}^h$.

Ainsi l'équation de continuité du flux d'enthalpie devient :

$$\sum F_i^- h_i^- + \Phi^- = \sum F_i^+ h_i^+ + \Phi^+ \quad (1.7.4)$$

Le flux d'entropie subit une discontinuité à la frontière due à la production irréversible d'entropie entre l'environnement et le réacteur :

$$F_s^- + \Sigma_I = F_s^+ \quad (1.7.5)$$

avec

$$F_s^- = \sum F_i^- s_i^- + \frac{\Phi^-}{T^-} \quad (1.7.6)$$

$$F_s^+ = \sum F_i^+ s_i^+ + \frac{\Phi^+}{T^+} \quad (1.7.7)$$

Par les relations thermodynamiques liant les flux d'enthalpie aux flux entropiques, nous obtenons :

$$\sum F_i^- h_i^- + \Phi^- = \sum_i \mu_i^- F_i^- + T^- \sum F_i^- s_i^- + T^- \frac{\Phi^-}{T^-} \quad (1.7.8)$$

$$\sum F_i^+ h_i^+ + \Phi^+ = \sum_i \mu_i^+ F_i^+ + T^+ \sum F_i^+ s_i^+ + T^+ \frac{\Phi^+}{T^+} \quad (1.7.9)$$

Avec la continuité de flux d'énergie (1.7.2) et les relations (1.7.6),(1.7.5),(1.7.1),(1.7.2), nous avons :

$$\sum_i \mu_i^- F_i^- + T^- \sum F_i^- s_i^- + \Phi^- = \sum_i \mu_i^+ F_i^+ + T^+ \left(\sum F_i^- s_i^- + \frac{\Phi^-}{T^-} + \Sigma_I \right) \quad (1.7.10)$$

Ainsi nous trouvons la production d'entropie créée en interface :

$$\Sigma_I = \sum_i F_i^- \frac{(\sum h_i^- - T^+ s_i^-)}{T^+} - \sum_i F_i^- \frac{(h_i^+ - T^+ s_i^+)}{T^+} + (T^- - T^+) \frac{\Phi^-}{T^+ T^-} \quad (1.7.11)$$

Soit :

$$\Sigma_I = \sum_i F_i^- \frac{(h_i^- - T^+ s_i^- - \mu_i^+)}{T^+} + \frac{\Phi^-}{T^+} - \frac{\Phi^-}{T^-} \quad (1.7.12)$$

Remarque 1.4. Le premier terme de la production irréversible d'entropie obtenu dans 1.7.12 correspond à celui obtenu pour le cas du RPAC ([44])

$$\sigma_{mel} = \sum_i F_i^{in} \frac{(h_i^{in} - T s_i^{in} - \mu_i)}{T} \quad (1.7.13)$$

où

- F_i^{in} représente le débit massique partiel de espèce i
- h_i^{in} l'enthalpie massique partielle de l' espèce i
- s_i^{in} l'entropie massique partielle de l'espèce i
- μ_i le potentiel chimique de l'espèce i
- T la température au sein du RPAC

1.7.2 Les conditions aux frontières

Nous admettons les hypothèses suivantes pour les conditions aux frontières :

- Nous supposons qu'il n'y a que l'espèce A à l'entrée du réacteur. Cette espèce est convectée à la même vitesse que dans le réacteur.
- Il n'y a pas de dispersion thermique à l'extérieur du réacteur.
- A la sortie, le réacteur est ouvert à la dispersion et à la dispersion thermique.

Avec ces hypothèses de continuité de flux. Nous obtenons en entrée :

$$\rho v \theta_{A_{in}} = F_{in}^A|_{0-} = (F_{dis}^A + F_{conv}^A)|_{0+} \quad (1.7.14)$$

$$0 = F_{in}^B|_{0-} = 0 = (F_{dis}^B + F_{conv}^B)|_{0+} \quad (1.7.15)$$

$$F_{in}^h|_{0-} = (F_{dis}^h + F_{conv}^h)|_{0+} \quad (1.7.16)$$

et en sortie :

$$F_{dis}^A|_L = 0, \quad (1.7.17)$$

$$F_{dis}^B|_L = 0 \quad (1.7.18)$$

$$F_{dis}^h|_L = 0 \quad (1.7.19)$$

1.7.2.1 Production irréversible d'entropie aux frontières

Nous déduisons directement à partir des équations (1.7.17),(1.7.18) et (1.7.19) et de l'expression de Σ_I que la production irréversible d'entropie due à l'interface en sortie du réacteur est nulle.

En prenant l'expression générale pour la production en interface (1.7.12)

$$\begin{aligned} \Sigma_I &= \sum_i F_i^- \frac{(h_i^- - T^+ s_i^- - \mu_i^+)}{T^+} + \frac{\Phi^-}{T^+} - \frac{\Phi^-}{T^-} \\ &= F_A|_{0-} \frac{(h_A|_{0-} - T_{0+} s_A|_{0-} - \mu_A|_{0+})}{T|_{0+}} + F_B|_{0-} \frac{(h_B|_{0-} - T|_{0+} s_B|_{0-} - \mu_B|_{0+})}{T|_{0+}} + \frac{\Phi_{0-}}{T|_{0+}} - \frac{\Phi_{0-}}{T|_{0-}} \end{aligned} \quad (1.7.20)$$

Avec l'hypothèse que $F_B|_{0-} = 0$ et $\Phi_{0-} = 0$ (il n'y a pas de dispersion thermique à l'entrée), nous avons :

$$\Sigma_I = F_{0-}^A \frac{(h_A|_{0-} - T|_{0+} s_A|_{0-} - \mu_A|_{0+})}{T|_{0+}} \quad (1.7.21)$$

1.8 Simulation du réacteur en boucle ouverte

Dans cette section, nous présentons les équations obtenues à partir de la méthode de discrétisation par différences finies puis nous présentons les résultats de simulation sur le système en boucle ouverte. Les simulations sont faites sur le logiciel Matlab.

1.8.1 Réduction spatiale pour la simulation

Nous utilisons la méthode de discrétisation par différences finies pour la simulation. Le domaine spatial est divisé en un nombre fini d'intervalles, appelés pas de discrétisation. Nous utilisons un maillage à pas fixe donnant un nombre fini de points de discrétisation x_i . Sur l'axe discret à pas fixe de taille Δx , les variables d'état z sont supposées dérivables deux fois, les développements de Taylor à l'ordre 2 au voisinage de x_i s'écrivent :

$$z(x_i + \Delta x, t) = z_{i+1}(t) = z_i(t) + \Delta x \frac{\partial z(t)}{\partial x} \Big|_{x=x_i} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 z(t)}{\partial x^2} \Big|_{x=x_i} + O(\Delta x^3) \quad (1.8.1)$$

$$z(x_i - \Delta x, t) = z_{i-1}(t) = z_i(t) - \Delta x \frac{\partial z(t)}{\partial x} \Big|_{x=x_i} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 z(t)}{\partial x^2} \Big|_{x=x_i} + O(\Delta x^3) \quad (1.8.2)$$

Nous utilisons un schéma centré pour la discrétisation. Nous obtenons :

1. pour la dérivée du premier ordre :

$$\frac{\partial z_i}{\partial x} = \frac{z_{i+1} - z_{i-1}}{2\Delta x} \quad (1.8.3)$$

2. pour la dérivée d'ordre 2 :

$$\frac{\partial^2 z_i}{\partial x^2} = \frac{z_{i+1} - 2z_i + z_{i-1}}{\Delta x^2} \quad (1.8.4)$$

1.8.1.1 Le modèle discretisé

A partir du schéma de discrétisation et des conditions aux frontières du domaine, nous obtenons pour les dérivées premières :

1. Pour les fractions massiques θ_i

$$\frac{\partial \theta_i}{\partial x} = \frac{\alpha}{2\Delta x} \begin{pmatrix} \theta_{i1} \\ \theta_{i2} \\ . \\ \theta_{in} \end{pmatrix} + \gamma_1 \theta_{in} \quad (1.8.5)$$

2. Pour la température

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\alpha_T}{2\Delta x} \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \\ . \\ T_n \end{pmatrix} + \gamma_{1T} T_{in} \quad (1.8.6)$$

Remarque 1.5. *Pour des raisons de simplicité, nous avons choisi de simuler la température au lieu de l'enthalpie.*

Il est facile à partir de la condition frontière sur l'enthalpie d'obtenir celle en température :

Nous rappelons la condition frontière concernant l'enthalpie (1.7.16) :

$$F_{in}^h|_{0-} = (F_{dis}^h + F_{conv}^h)|_{0+} \quad (1.8.7)$$

$$\rho v h_{A_{in}} = (F_{dis}^A + F_{conv}^A)|_{0+} h_A|_{0+} + (F_{dis}^B + F_{conv}^B)|_{0+} h_B|_{0+} + F_{cond}|_{0+} \quad (1.8.8)$$

Avec la continuité de flux de matière 1.7.14 et 1.7.15

$$(F_{dis}^A + F_{conv}^A)|_{0+} = \rho v \theta_{A_{in}} \quad (1.8.9)$$

$$(F_{dis}^B + F_{conv}^B)|_{0+} = 0 \quad (1.8.10)$$

nous obtenons :

$$\rho v h_{A_{in}} = \rho v \theta_{A_{in}} h_A|_{0+} - \lambda \frac{dT}{dx}|_{0+} \quad (1.8.11)$$

Nous avons donc la condition frontière pour la température :

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial x}|_0 = v \rho (h_A|_0 - h_{A_{in}}) \quad (1.8.12)$$

Pour les dérivées secondes, nous obtenons pour les fractions massiques et la température :

$$\frac{\partial^2 z}{\partial x^2} = \frac{\beta}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ . \\ z_n \end{pmatrix} + \gamma_2 z_{in} \quad (1.8.13)$$

En considérant les conditions frontières (1.7.14) à (1.7.16), nous obtenons :

$$\frac{\partial \theta_A}{\partial x}|_0 = \frac{v}{D} (\theta_A|_0 - 1) \quad (1.8.14)$$

$$\frac{\partial \theta_B}{\partial x}|_0 = \frac{v}{D} \theta_B|_0 \quad (1.8.15)$$

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial x}|_0 = v \rho (h_A|_0 - h_{A_{in}}) \quad (1.8.16)$$

et avec les contraintes en sortie

$$\theta_A|_L = \theta_A|_{L+}, \quad (1.8.17)$$

$$\theta_B|_L = \theta_B|_{L+} \quad (1.8.18)$$

$$T|_L = T|_{L+} \quad (1.8.19)$$

Nous obtenons les matrices de discrétisation ci-dessous :

$$\alpha = \begin{pmatrix} 2\Delta x \frac{v}{D} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}, \alpha_T = \begin{pmatrix} \frac{2\Delta x v \rho c_{pA}}{\lambda} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.8.20)$$

$$\gamma_1^T = \begin{pmatrix} -\frac{v}{D} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \gamma_{1T}^T = - \begin{pmatrix} \frac{xv\rho c_{pA}}{\lambda} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.8.21)$$

$$\beta = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.8.22)$$

$$\gamma_2^T = \begin{pmatrix} \frac{1}{\delta x^2} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.8.23)$$

1.8.2 Valeurs numériques et conditions opératoires

Le nombre de pas de discrétisation est fixé à 100. A partir de ce nombre de pas les résultats sont précis et sont identiques à ceux correspondant à un nombre plus grand de pas de discrétisation.

Pour réaliser la simulation en boucle ouverte, nous avons fixé les conditions opératoires suivantes :

- $T_j(x, t) = 370K$,
- $T_{in}(t) = 330K$,
- $\theta_{A_{in}} = 1$.

Nous choisissons comme profil initial d'état le profil stationnaire correspondant à $T_j(x, t) = 350K$.

1.8.3 Résultats de simulation

Dans cette section nous donnons l'évolution dynamique des différentes variables d'état.

Symb.	Valeur numérique	Symb.	Valeur numérique
c_{pA}	$150.48 J/(K \cdot g)$	c_{pB}	$120 J/(K \cdot g)$
C	$1.25 \cdot 10^5 W/(m \cdot K)$	E	$72.335 K J/mol$
h_{Aref}	$0 J/g$	h_{Bref}	$-9150 J/g$
k_0	$0.12 \cdot 10^{10} 1/s$	L	$1m$
M_A	$0.5 g/mol$	M_B	$0.5 g/mol$
R	$8.314 J/(K \cdot mol)$	s_{Aref}	$210.4 J/(K \cdot g)$
s_{Bref}	$180.2 J/(K \cdot g)$	T_{ref}	$300 K$
v	$0.0005 m^3/mol$	V	$0.001 m^3$
λ	$1.25 \cdot 10^8 J/(K \cdot m \cdot s)$		

TABLE 1.1 – Valeur numérique des paramètres.

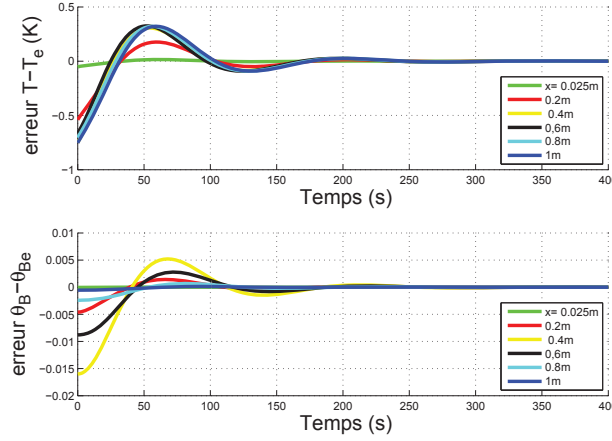


FIGURE 1.8.1 – Réponse temporelle du système

La figure 1.8.1 nous montre la réponse temporelle d'erreur entre la température T et son profil initial $T_{initial}$ et de fraction massique θ_B avec son profil initial $\theta_{Binitial}$.

Nous montrons aussi la validité de l'équation de Gibbs Duhem (1.2.55) : $\frac{\partial w^T}{\partial x} z = 0$ en figure 1.8.1 pour le cas traité dans cette thèse.

1.9 Conclusion et perspectives

Dans ce chapitre, nous avons présenté les modèles en représentation entropique et énergétique qui serviront tout au long du manuscrit. Nous rappelons que les modèles obtenus ne font aucune hypothèse sur la capacité thermique totale ni sur l'enthalpie de réaction. Ces deux quantités deviennent des fonctions dépendant de l'état. Nous avons aussi présenté les résultats de simulation du réacteur en boucle ouverte. Nous allons maintenant nous intéresser aux

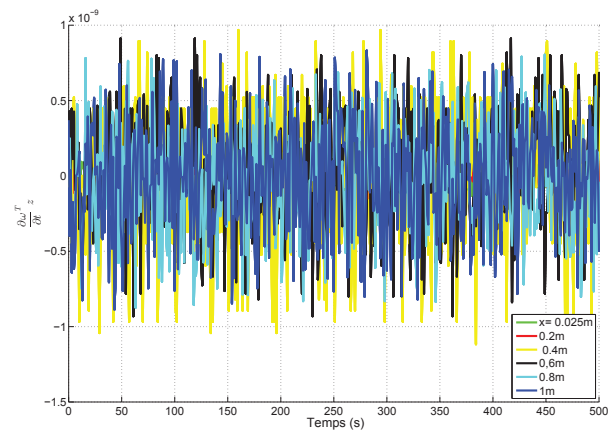


FIGURE 1.8.2 – Validation numérique de l'équation de Gibbs-Duhem

fonctions thermodynamiques, la disponibilité thermodynamique et la disponibilité réduite, qui serviront pour la synthèse de commande.

Chapitre 2

La disponibilité thermodynamique

2.1 Introduction

La stabilisation des systèmes dynamiques telle que nous l’envisageons dans cette thèse nécessite l’emploi d’une fonction de Lyapunov. Les potentiels ou fonctions thermodynamiques pour la commande ou l’analyse de stabilité sont très peu utilisées.

J. Tarbell [76] utilise une fonction de Lyapunov issue de la thermodynamique et qui ressemble à la production irréversible d’entropie pour l’analyse de la stabilité locale du RPAC. A. Alonso et E. Ydstie étudient la passivité d’une classe de systèmes thermodynamiques en utilisant l’énergie libre de Helmholtz* qui, dans le contexte où les auteurs l’utilisent, est une fonction bornée inférieurement puisque toujours positive ou nulle. A. Favache et D. Dochain discutent de l’utilisation de la production irréversible d’entropie, de l’entropie et de l’énergie interne comme fonction de Lyapunov candidate pour l’étude de stabilité du RPAC. Ces fonctions sont toutes très insatisfaisantes quant à leur utilisation comme fonction de Lyapunov dans le cas du RPAC.

Dans ce chapitre, nous allons présenter la disponibilité thermodynamique qui sera utilisée au chapitre suivant comme fonction de Lyapunov candidate pour la stabilisation du réacteur.

2.1.1 Historique de la fonction de disponibilité thermodynamique

La fonction de disponibilité thermodynamique est liée aux concepts de travail disponible et d’exergie [53]. Ces notions sont basées sur la capacité des systèmes à échanger de l’énergie *utile*, c’est-à-dire de l’énergie qui pourra être utilisée par exemple pour fournir un travail, et permet de quantifier du point de vue d’un des systèmes l’efficacité de cet échange. Ces notions ont été établies pour les systèmes ouverts sans réaction avec un environnement supposé à température, pression et potentiel chimique constants [86],[87],[75].

La disponibilité thermodynamique est la généralisation de ces concepts aux systèmes avec réaction pour un environnement quelconque. Elle a été introduite par A. Alonso and E. Ydstie

*, $F = H - TS$ avec l’enthalpie H , T la température absolue et S l’entropie

[5, 6]. La disponibilité thermodynamique est définie à partir de l'entropie. La convexité de cette dernière est basée sur la concavité de l'entropie pour un mélange homogène. Les auteurs l'ont utilisée pour étudier la passivité des systèmes de transport avec réaction [7][91][70]. Cette notion de disponibilité est aussi appelée disponibilité en vision entropique.

Remarque 2.1. *Une notion de disponibilité en vision énergétique peut aussi être définie à partir de l'énergie interne. La convexité de cette dernière sera basée sur la convexité de l'énergie interne pour un mélange homogène.*

Cette fonction de disponibilité en vision entropique a été utilisée pour la synthèse de commande pour les réacteurs en dimension finie (CSTR) dans [44].

2.1.2 Organisation du chapitre

L'objectif de ce chapitre est de présenter la fonction de la disponibilité thermodynamique ainsi qu'une autre fonction thermodynamique intéressante pour la commande et que nous nommons *disponibilité réduite*.

Le chapitre est organisé comme suit : Dans la section 2.3, nous rappelons la fonction de la disponibilité thermodynamique en vision entropique et ses propriétés. Nous discutons aussi la fonction de la disponibilité en vision énergétique et ses propriétés.

Dans la section 2.4, nous présentons la fonction de disponibilité en dimension infinie. Pour l'objectif de commande, nous présentons la disponibilité locale ainsi que la disponibilité globale. Par ailleurs nous rappelons certains résultats concernant la passivité des systèmes de transport avec réaction en utilisant cette fonction de disponibilité.

Nous introduisons respectivement en section 2.5 la fonction de la disponibilité réduite. Nous discutons dans un premiers temps ses propriétés en dimension finie puis en dimension infinie. Nous donnons la disponibilité réduite locale et globale. La passivité du système est aussi analysée en utilisant cette fonction.

2.2 Mes contributions

Les contributions principales de ce chapitre sont le développement de la notion de disponibilité réduite en dimension infinie et une présentation exhaustive des propriétés de la disponibilité et de la disponibilité thermodynamique.

2.3 La disponibilité thermodynamique en dimension finie

Dans cette section, nous rappelons la définition de la disponibilité thermodynamique et donnons ses propriétés.

Définition 2.1. *La disponibilité thermodynamique A en vision entropique est définie par rapport à un état de référence défini par le couple de variables extensives Z_d et intensives $w(Z_d) = w_d$ comme :*

$$A(Z) = S(Z_d) + w_d^T(Z - Z_d) - S(Z) = -\tilde{w}^T Z \quad (2.3.1)$$

où Z le vecteur des variables extensives, $w(Z)$ celui des variables intensives dans la représentation entropique définie au chapitre 1 :

$$\begin{aligned} w &= \left(\frac{1}{T} \quad \frac{p}{T} \quad -\frac{\mu_1}{T} \quad \dots \quad -\frac{\mu_n}{T} \right)^T \\ Z &= \left(U \quad V \quad N_1 \quad \dots \quad N_n \right)^T \end{aligned}$$

et $\tilde{w} = w - w_d$.

2.3.1 L'interprétation géométrique

Nous rappelons que les variables intensives ω_d^T sont définies comme (voir chapitre 1)

$$\omega_d^T = \left(\frac{\partial S(Z)}{\partial Z} \right) |_{Z=Z_d} \quad (2.3.2)$$

cette relation peut aussi être interprétée comme la tangente à S en $Z = Z_d$.

On remarque que l'expression (2.3.1) se décompose en deux termes :

- un hyperplan $S(Z_d) + w_d^T(Z - Z_d)$ tangent à la courbe d'entropie au point Z_d
- l'entropie $S(Z)$

La disponibilité est l'écart entre l'hyperplan et l'entropie.

Par ailleurs de par l'hypothèse d'équilibre local (voir chapitre 1), on sait que l'entropie est une fonction concave par rapport à Z . On sait qu'une fonction concave est telle que sa courbe représentative est au-dessous de chacune de ses tangentes, donc en particulier au dessous de l'hyperplan $S(Z_d) + w_d^T(Z - Z_d)$; On en déduit que la disponibilité est une fonction convexe non négative.

La Figure 2.3.1 illustre en dimension 1 cette interprétation géométrique.

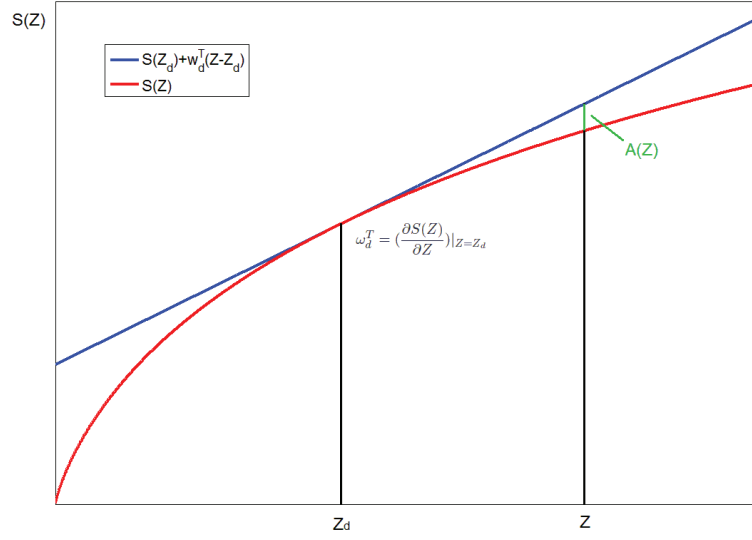
2.3.2 Les propriétés de la disponibilité thermodynamique

Propriété 2.1. [44] $A(Z)$ est une fonction homogène de degré 1 par rapport à z

$$A(\gamma Z) = \gamma A(Z) \quad \forall \gamma \text{ constante positive} \quad (2.3.3)$$

Démonstration. Par définition :

$$A(Z) = -\tilde{w}^T Z = (w_d - w)^T Z = (w_d - w)^T Z \quad (2.3.4)$$

FIGURE 2.3.1 – Représentation de la fonction de la disponibilité par rapport l'état de référence Z_d

On en déduit :

$$A(\gamma Z) = (w_d - w(\gamma Z))^T \gamma Z = \gamma (w_d - w(Z))^T Z = \gamma A(Z, Z_d) \quad (2.3.5)$$

puisque \tilde{w} est une fonction homogène de degré 0 par rapport à Z . \square

Propriété 2.2. [44] Si l'entropie est concave alors

$$A(Z) > 0, Z \neq \gamma Z_d \quad \gamma > 0 \quad (2.3.6)$$

$$A(Z) = 0, Z = \gamma Z_d \quad (2.3.7)$$

Démonstration. Nous avons déjà montré que A est une fonction non négative. Les vecteurs directeurs de l'hyperplan tangent à l'entropie correspondent aux élément du vecteur $w = \left(\frac{\partial S}{\partial U} \quad \frac{\partial S}{\partial V} \quad \frac{\partial S}{\partial M_i} \right)^T = \left(\frac{1}{T} \quad \frac{P}{T} \quad -\frac{\mu_i}{T} \right)^T$. Les composantes de w sont des variables homogènes de degré 0. On a donc pour toute constante positive γ

$$\begin{aligned} T(\gamma Z) &= T(Z) \\ p(\gamma Z) &= p(Z) \\ \mu_i(\gamma Z) &= \mu_i(Z) \end{aligned} \quad (2.3.8)$$

Ainsi il existe une infinité de points Z ayant une tangente commune à celle indexée par d :

$$\frac{U}{U_d} = \frac{V}{V_d} = \frac{N_1}{N_{1d}} = \dots = \frac{N_n}{N_{nd}} = \gamma \quad (2.3.9)$$

où $Z_d = (U_d, V_d, N_{1d}, \dots, N_{nd})$ est un point dans l'espace des variables extensives. La relation (2.3.9) définit le rapport d'homogénéité.

Ainsi pour ces points $Z = \gamma Z_d$, puisque w est un vecteur de fonction homogène de degré 0, on a :

$$A(Z) = A(\gamma Z_d) = -\tilde{w}^T Z = (w_d - w(\gamma Z_d))^T Z_d = 0 \quad \forall \gamma \quad (2.3.10)$$

□

Si l'entropie n'est pas strictement concave, il y a un sous-espace déterminé par la base (U, V, N_1, \dots, N_n) satisfaisant (2.3.9). Ainsi la disponibilité s'annule sur un sous-espace de dimension 1 par rapport à l'espace de dimension $(n + 2)$.

Pour illustrer cette propriété, La Figure 2.3.2 montre la fonction de disponibilité d'un mélange idéal en phase liquide de deux espèces dans le cas isotherme et isobare. Nous considérons que l'entropie $S(N_1, N_2)$ est donnée par

$$S = -N_1 \ln\left(\frac{N_1}{N_1 + N_2}\right) - N_2 \ln\left(\frac{N_2}{N_1 + N_2}\right) \quad (2.3.11)$$

La fonction de disponibilité est calculée pour $Z_d = \begin{pmatrix} N_{1d} & N_{2d} \end{pmatrix}^T = \begin{pmatrix} N_d & N_d \end{pmatrix}^T$. Par ailleurs en rouge on voit la droite singulière qui correspond aux points où $A(Z) = 0$ et plus particulièrement ici à la droite $N_1 = N_2$.

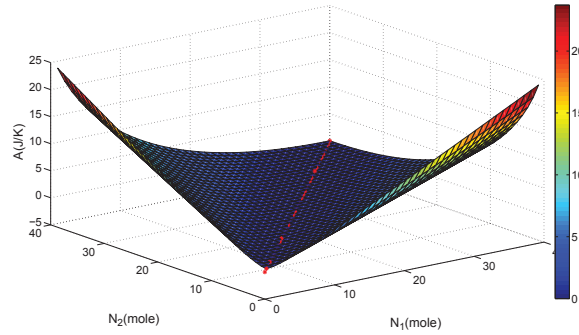


FIGURE 2.3.2 – La fonction de la disponibilité et la droite singulière

Afin d'assurer que la disponibilité s'annule en un seul point, il faut fixer le rapport d'homogénéité. En posant une contrainte sous forme d'une combinaison linéaire non nulle des variables extensives [47], on rend l'entropie strictement concave et la disponibilité thermodynamique devient strictement convexe.

On en déduit :

Propriété 2.3. [6] *Si l'entropie est strictement concave alors*

$$A(Z) > 0, Z \neq Z_d \quad (2.3.12)$$

$$A(Z) = 0, Z = Z_d \quad (2.3.13)$$

2.3.3 Fonction de Lyapunov et disponibilité thermodynamique

L'objectif de cette section est de préciser certaines notations qui seront utilisées dans le chapitre suivant. Tout d'abord nous rappelons la définition d'une fonction de Lyapunov :

Définition 2.2. [54]

Soient $Z = 0$ un point d'équilibre et $D \in R^n$ un domaine contenant $Z = 0$. Soit $V : D \rightarrow R$ une fonction continûment différentiable telle que :

$$V(0) = 0 \quad \text{and} \quad V(Z) > 0 \quad \text{in} \quad D - \{0\} \quad (2.3.14)$$

$$\dot{V}(Z) \leq 0 \quad \text{in} \quad D \quad (2.3.15)$$

La fonction $V(Z)$ satisfaisant (2.3.14) et (2.3.15) est appelée fonction de Lyapunov.

On peut remarquer compte tenu de la propriété 2.3 que la disponibilité thermodynamique satisfait uniquement les relations (2.3.14) de la définition 2.2. On définit :

Définition 2.3. *Soient $Z = 0$ un point d'équilibre et $D \in R^n$ un domaine contenant $Z = 0$. Soit $V : D \rightarrow R$ une fonction continûment différentiable telle que :*

$$V(0) = 0 \quad \text{and} \quad V(Z) > 0 \quad \text{in} \quad D - \{0\} \quad (2.3.16)$$

La fonction $V(Z)$ satisfaisant (2.3.16) est appelée fonction de Lyapunov candidate.

La fonction de disponibilité est une fonction de Lyapunov candidate.

2.3.4 Disponibilité thermodynamique en vision énergétique

Outre la disponibilité en vision entropique, on peut aussi utiliser la disponibilité en vision énergétique. Cette notion est équivalente à la notion d'accumulation disponible (c'est la maximum d'énergie qu'on peut extraire du système) proposée par J. Willems ([88]).

Cette fonction de la disponibilité A_u est basée sur l'équation de Gibbs (1.2.10) en vision énergétique :

$$dU = w_u^T dZ_u \quad (2.3.17)$$

avec le vecteur des variables extensives Z_u et le vecteur des variables intensives $w_u(Z_u)$ suivants :

$$\begin{aligned} Z_u &= \begin{pmatrix} S & V & N_1 & \dots & N_n \end{pmatrix}^T \\ w_u &= \begin{pmatrix} T & -p & \mu_1 & \dots & \mu_n \end{pmatrix}^T \end{aligned}$$

Définition 2.4. La fonction de disponibilité énergétique par rapport à l'état de référence défini par le couple de variables Z_{u_d} et $w(Z_{u_d}) = w_{u_d}$ est donnée par :

$$A_u(Z) = U(Z_u) - U(Z_{u_d}) - w_{u_d}^T (Z_u - Z_{u_d}) = \tilde{w}_u^T Z_u \quad (2.3.18)$$

avec $\tilde{w}_u = w_u - w_{u_d}$ et

$$w_u = \left(\frac{\partial U(Z_u)}{\partial Z_u} \right)^T \quad w_{u_d} = \left(\frac{\partial U(Z_u)}{\partial Z_u} \right)^T \Big|_{Z=Z_{u_d}} \quad (2.3.19)$$

Tout comme dans la section 2.3.1, on peut représenter facilement la disponibilité thermodynamique A_u comme l'écart entre l'énergie U qui est une fonction convexe et l'hyperplan tangent à l'énergie en $Z = Z_{u_d}$. Cette quantité est non négative (voir Figure 2.3.3).

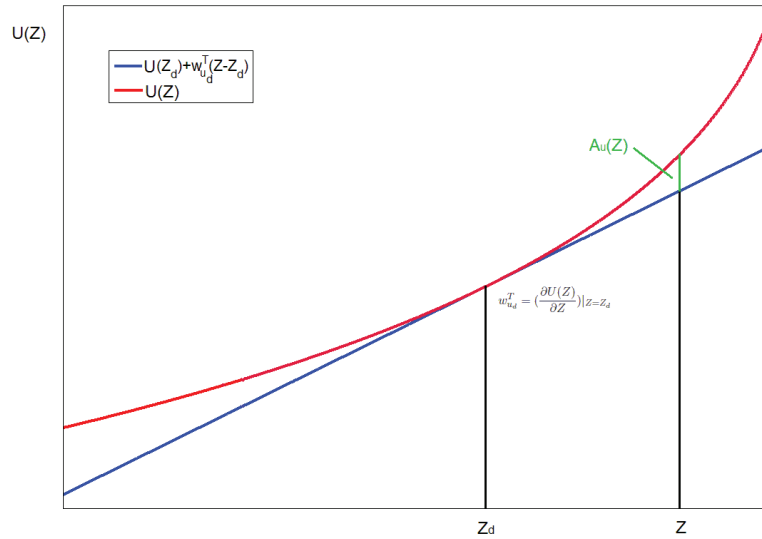


FIGURE 2.3.3 – Représentation de la disponibilité A_u par rapport à l'état de référence Z_{u_d}

Nous pouvons aussi montrer les propriétés suivantes :

Propriété 2.4. A_u est une fonction homogène de degré 1 par rapport à z

$$A_u(\gamma Z_u) = \gamma A_u(Z_u) \quad (2.3.20)$$

Propriété 2.5. Si l'énergie est strictement convexe alors

$$A_u > 0, Z_u \neq Z_{u_d} \quad (2.3.21)$$

$$A_u = 0, Z_u = Z_{u_d} \quad (2.3.22)$$

Nous n'utiliserons pas dans cette thèse cette notion de disponibilité.

2.4 La fonction de disponibilité en dimension infinie

Dans cette section, nous allons analyser la fonction de disponibilité en dimension infinie.

2.4.1 Formulation locale de la disponibilité

Pour les systèmes en dimension infinie, nous définissons une densité de fonction de la disponibilité $a(z(x, t))$:

$$a(z(x, t)) = -(w(z(x, t)) - \overbrace{w(z_d(x))}^{w_d})^T z(x, t) \quad (2.4.1)$$

Dans le cas en dimension 1, nous obtenons la disponibilité globale A :

$$A = \int_0^L a(z(x, t)) dx \quad (2.4.2)$$

2.4.2 Les propriétés de la densité de disponibilité

Le vecteur d'état z est composé de fonctions qui sont des concentrations linéiques, qui ne sont pas des fonctions homogènes de degré 1. Pour les ramener à des variables homogènes de degré 1, il faut définir des extensités infinitésimales. Nous rappelons que si on multiplie les quantités de matière d'un système par k alors les extensités sont aussi multipliées par k .

Avec les notations définies au chapitre 1 nous définissons les extensités infinitésimales suivantes sur les variables d'état z :

$$\rho \hat{z} dx = z dx = z_f \quad (2.4.3)$$

avec $z = \begin{pmatrix} h & \rho_A & \rho_B \end{pmatrix}$ où $\rho_A = \rho \theta_A$, $\rho_B = \rho \theta_B$ et $h = \rho_A h_A + \rho_B h_b$. Par exemple la masse élémentaire dm se ramène par le biais de ρ , la masse linéique totale supposée dans notre cas constante, à $dm = \rho dx$ où dx est l'élément spatial élémentaire. Les quantités globales sur le réacteur sont obtenues comme :

$$Z = \int_0^L z dx = \int_0^L z_f \quad (2.4.4)$$

Propriété 2.6. *La forme différentielle $a_f = (w_d - w(z))z_f$ est une fonction homogène de degré 1 par rapport à z_f .*

$$a_f(\gamma z_f) = \gamma a_f(z_f) \quad (2.4.5)$$

Démonstration. Nous avons par hypothèse les propriétés suivantes :

- z_f est une fonction homogène de degré 1
- z est une fonction homogène de degré 0
- w est une fonction homogène de degré 0

En réexprimant l'expression locale de la disponibilité (2.4.1) :

$$a = (w_d - w(z))z \quad (2.4.6)$$

en formes différentielles :

$$a_f(z_f) = (w_d - w(z))z_f \quad (2.4.7)$$

nous obtenons :

$$a_f(\gamma z_f) = \gamma a_f(z_f) \quad (2.4.8)$$

□

Propriété 2.7. [6] *Si l'entropie s est strictement concave alors*

1. a est strictement convexe
2. $a(z) > 0, z \neq z_d$
3. $a(z) = 0, z = z_d$

Démonstration. La première propriété découle de la stricte concavité de l'entropie basée sur l'hypothèse que ρ est constant.

Avec cette hypothèse, nous avons les égalités (1.2.53) et (1.2.54) : $\frac{\partial S}{\partial H} = \frac{\partial s}{\partial h}$ et $\frac{\partial S}{\partial M_i} = \frac{\partial s}{\partial \rho_i}$ qui définissent bien les variables intensives w .

Nous avons avec la remarque 1.1 du chapitre 1 :

$$\frac{\partial a}{\partial z} = -(w(z) - w_d) \quad (2.4.9)$$

Nous calculons le Hessien de a :

$$M = \frac{\partial^2 a}{\partial z_i \partial z_j} = \frac{\partial^2 s}{\partial z_i \partial z_j} \quad (2.4.10)$$

Par hypothèse, l'entropie est strictement concave donc $\frac{\partial^2 s}{\partial z_i \partial z_j} < 0$

On en déduit facilement la stricte convexité de a :

$$M = \frac{\partial^2 a}{\partial z_i \partial z_j} > 0 \quad (2.4.11)$$

Avec la stricte convexité de a , nous avons l'inégalité ci-dessous :

$$a(z) > \frac{\partial a(z)}{\partial z} \Big|_{z=z'} (z - z') + a(z') \quad \forall z, z' \quad z \neq z' \quad (2.4.12)$$

Cette inégalité est valide en particulier pour $z' = z_d$:

$$a(z) > \frac{\partial a(z)}{\partial z} \Big|_{z=z_d} (z - z_d) + a(z_d) \quad \forall z \neq z_d \quad (2.4.13)$$

On en déduit les points 2 et 3 de la propriété :

$$\begin{aligned} a(z) &> -(w(z_d) - w_d)(z - z_d) + a(z_d) = 0 \quad \forall z \neq z_d \\ a(z_d) &= 0 \end{aligned} \quad (2.4.14)$$

□

Propriété 2.8. [6]

Soit la fonction $g(z, z_d) = -\tilde{w}\tilde{z}$ avec $\tilde{w} = w(z) - w(z_d)$ et $\tilde{z} = z - z_d$. Si l'entropie s est strictement concave alors on a :

1. $0 \leq a(z) \leq g(z, z_d)$
2. $\tilde{w} = -Q(z, z_d)\tilde{z}$, où $Q(z, z_d)$ est une matrice définie positive.

Démonstration. Pour le point 1, nous avons déjà montré que $a(z) \geq 0$.

Repartons de l'inégalité (2.4.12) :

$$a(z) \geq \frac{\partial a(z)}{\partial z} \Big|_{z=z'} (z - z') + a(z') \forall z'$$

Cette inégalité reste vraie pour $z = z_d$:

$$0 = a(z_d) \geq \frac{\partial a(z)}{\partial z} \Big|_{z=z'} (z_d - z') + a(z') \forall z'$$

Cette inégalité peut se réécrire comme

$$0 \geq \overbrace{-(w(z') - w_d)(z_d - z')}^{-g(z', z_d)} + a(z') \forall z'$$

On obtient alors le résultat :

$$0 \geq a(z') \geq g(z', z_d) \forall z' \quad (2.4.15)$$

Pour le point 2, nous utilisons le lemme suivant :

Lemme 1. [30] (page 71-72)

Soit une fonction f continûment différentiable sur un ouvert $D \subset \mathbb{R}^n$. Alors pour $x \in D$ et pour toute perturbation non nulle $p \in \mathbb{R}^n$ on a :

$$f(x + p) = f(x) + \int_0^1 \nabla f(x + \tau p)^T p d\tau \quad (2.4.16)$$

$$\text{où } \nabla f(x + \tau p) = [\frac{\partial f}{\partial x_1}(x + \tau p), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(x + \tau p)]^T$$

Si nous considérons que $f = \frac{\partial a}{\partial z} = -(w - w_d)$, $p = -(z - z_d)$, $x = z$, nous avons donc l'expression :

$$0 = -\omega(z_d) + \omega_d = -\omega(z) + \omega_d + \left[\int_0^1 \nabla \omega(z - \tau(z - z_d))^T d\tau \right] (z - z_d) \quad (2.4.17)$$

On en déduit à partir de la relation (2.4.11)

$$w(z) - w(z_d) = -\left[\int_0^1 M(z - \tau(z - z_d))d\tau\right](z - z_d) \quad (2.4.18)$$

Posons $Q = [\int_0^1 M(z - \tau(z - z_d))d\tau]$. Comme M est définie positive grâce à la convexité de a , Q est définie positive. Il existe donc une injection entre \tilde{w} et \tilde{z} .

□

Propriété 2.9. [6]

La disponibilité locale $a(z)$ vérifie :

$$0 \leq q_0 \tilde{z}^T \tilde{z} \leq a(z) \leq q_1 \tilde{z}^T \tilde{z} \quad (2.4.19)$$

pour deux constantes positives q_0 et q_1 . L'égalité est vérifiée pour $z = z_d$ uniquement.

Démonstration. Nous définissons deux constantes positives :

$$q_0 = \frac{1}{2} \inf_{0 \leq \tau \leq 1, \|x\|=1} \frac{x^T M(z - \tau(z - z_d))x}{x^T x} \quad (2.4.20)$$

$$q_1 = \sup_{\|x\|=1} \frac{x^T Q x}{x^T x} \quad (2.4.21)$$

Le développement en série de Taylor de a permet d'obtenir $a(z) = \overbrace{a(z_d)}^{=0} + \overbrace{\frac{\partial a}{\partial z}|_{z=z_d}^T}^{=0} (z - z_d) + \frac{1}{2}(z - z_d)^T M(z - \tau(z - z_d))|_{z=z_d} (z - z_d) + o((z - z_d)^3)$. Nous obtenons donc :

$$a(z) \geq \tilde{q}_0 z^T \tilde{z} \quad (2.4.22)$$

puisque a est convexe et q_0 correspond au point de courbure le plus faible. La borne supérieure découle de la propriété 2.8 et de la positivité de Q : $a(z) \leq g(z, z_d)$.

$$\text{On a } g(z, z_d) = -(w(z) - w(z_d))(z - z_d) = (z - z_d)^T Q (z - z_d) \leq q_1 \tilde{z}^T \tilde{z}$$

Nous obtenons $a \leq q_1 \tilde{z}^T \tilde{z}$.

□

2.4.3 Droite singulière en dimension infinie

En dimension finie, nous avons montré qu'il existe une droite singulière due à la non stricte concavité de l'entropie. La solution proposée pour rendre l'entropie strictement concave a été de contraindre une variable extensive à rester constante. Pour les systèmes à paramètres distribués, il suffit de fixer une variable extensive globale. Ces variables correspondent aux variables d'inventaires ([52]).

Nous proposons de fixer la masse totale dans le réacteur. Nous choisissons de fixer la masse totale :

$$\rho_A + \rho_B = \rho \quad (2.4.23)$$

Avec cette hypothèse, la fonction d'entropie locale devient strictement concave.

2.4.4 La dynamique de la disponibilité

Pour calculer la dérivée temporelle de la disponibilité locale, nous allons utiliser la dérivée matérielle décrite au chapitre 1 et l'équation de Gibbs en dimension infinie (1.2.30) : $\frac{Ds}{Dt} = w^T \frac{Dz}{Dt}$.

Avec la notation $\tilde{w} = w - w_d$, nous obtenons :

$$\begin{aligned} \frac{Da}{Dt} &= \frac{D(-s + w_d z)}{Dt} \\ &= -(w^T \frac{Dz}{Dt} - w_d^T \frac{Dz}{Dt}) + v \frac{\partial w_d^T}{\partial x} z \end{aligned} \quad (2.4.24)$$

ou encore :

$$\begin{aligned} \frac{\partial a}{\partial t} &= -\tilde{w}^T \left(\frac{\partial z}{\partial t} + v \frac{\partial z}{\partial x} \right) - v \frac{\partial a}{\partial x} + v \frac{\partial w_d^T}{\partial x} z \\ &= -\tilde{w}^T \frac{\partial z}{\partial t} + v \frac{\partial \tilde{w}^T}{\partial x} z + v \frac{\partial w_d^T}{\partial x} z \\ &= -\tilde{w}^T \frac{\partial z}{\partial t} + v \frac{\partial w^T}{\partial x} z \end{aligned} \quad (2.4.25)$$

On a vérifié au chapitre 1 que le terme convectif $v \frac{\partial w^T}{\partial x} z$ est nul (cf.(1.2.56)). La dérivée temporelle de la fonction de la disponibilité devient :

$$\frac{\partial a}{\partial t} = -\tilde{w}^T \frac{\partial z}{\partial t} \quad (2.4.26)$$

Pour la dérivée temporelle de la disponibilité globale nous obtenons :

$$\frac{dA(t)}{dt} = \int_0^L \frac{\partial a}{\partial t} dx = \int_0^L -\tilde{w}^T \frac{\partial z}{\partial t} dx \quad (2.4.27)$$

En reprenant la formulation compacte du modèle de réacteur tubulaire (1.5.6) que nous rappelons :

$$\frac{\partial z}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} F + R + gq$$

Nous obtenons :

$$\frac{dA(t)}{dt} = - \int_0^L \tilde{w}^T (R + gq) dx + \int_0^L \tilde{w}^T \frac{\partial F}{\partial x} dx \quad (2.4.28)$$

Remarque 2.2. *Nous avons aussi*

$$\frac{\partial a}{\partial t} = -\tilde{w}^T \frac{\partial \tilde{z}}{\partial t} \quad (2.4.29)$$

avec $\frac{\partial z_d}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} F|_d + R|_d + gq|_d = 0$ où $F|_d = F|_{z_d}$, $R|_d = R|_{z_d}$, $q|_d = q|_{z_d}$.

De même que

$$\frac{dA(t)}{dt} = - \int_0^L \tilde{w}^T (\tilde{R} + g\tilde{q}) dx + \int_0^L \tilde{w}^T \frac{\partial \tilde{F}}{\partial x} dx \quad (2.4.30)$$

avec $\tilde{F} = F - F|_d$, $\tilde{R} = R - R|_d$, $\tilde{q} = q|_d - q$.

2.4.5 Utilisation de la disponibilité pour étudier la passivité en boucle ouverte

Dans cette sous-section, nous utilisons la fonction de la disponibilité pour étudier la passivité en boucle ouverte pour le réacteur tubulaire. Ces résultats ont été montrés dans [6, 70] dans le cas de lois constitutives linéaires pour les phénomènes sans convection puis généralisés pour des lois non linéaires.

Nous rappelons la notion de la passivité :

Définition 2.5. [80, 81] Un système avec une entrée $u \in \mathbb{R}^m$ et une sortie $y \in \mathbb{R}^m$ est dit passif s'il existe une fonction non négative $W(z)$ qui, le long des trajectoires du système, vérifie la relation suivante :

$$\frac{dW}{dt}(z) = u^T y - d(z)$$

où u et y sont, respectivement, l'entrée et la sortie du système et $d(z) \geq 0 \forall z$ est un terme représentant la dissipation. Si $d(z) > 0$ le système est dit strictement passif

A partir de la dynamique de la disponibilité globale (2.4.30), nous faisons l'intégration par partie du terme des flux \tilde{F} :

$$\begin{aligned} \frac{dA}{dt} &= - \int_0^L \tilde{w} \left(-\frac{\partial \tilde{F}}{\partial x} + \tilde{R} + g\tilde{q} \right) dx \\ &= [\tilde{w}^T \tilde{F}]_0^L - \int_0^L \left(\frac{\partial \tilde{w}^T}{\partial x} \tilde{F} \right) dx - \int_0^L \tilde{w}^T (\tilde{R} + g\tilde{q}) dx \end{aligned} \quad (2.4.31)$$

Remarque 2.3. \tilde{F} est composé des flux de convection $\tilde{F}_{conv} = F_{conv} - F_{conv}|_d = v(z - z_d)$ et des flux de dispersion $\tilde{F}_d = F_d - F_d|_d$.

Nous allons par la suite examiner le cas sans convection

2.4.5.1 Cas linéaire et sans convection

Dans [70], les auteurs examinent le cas sans convection avec des lois constitutives linéaires de la forme :

$$\begin{aligned} F &= L \frac{\partial w}{\partial x} \\ R &= Kw \end{aligned} \quad (2.4.32)$$

où L et K sont symétriques définies non-négatives.

Ces lois constitutives sont basées sur la thermodynamique irréversible linéaire [29, 35]. Les flux pour la dispersion sont des fonctions linéaires des forces thermodynamiques $X = \frac{\partial w}{\partial x}$.

Afin d'assurer la positivité des termes de production irréversible d'entropie qui seront de la forme $\frac{\partial w}{\partial x}^T L \frac{\partial w}{\partial x}$ pour la dispersion et de la forme $w^T K w$ pour la réaction, les matrices symétriques L et K doivent être définies non-négatives.

Proposition 2. [70] *Sous l'hypothèse que la matrice L est définie positive le système sans convection*

$$\frac{\partial \tilde{z}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \tilde{F} + \tilde{R} + g\tilde{q}$$

avec les lois linéaires (2.4.32) est strictement passif :

$$\frac{dA}{dt} \leq [\tilde{F}^T \tilde{w}]_0^L - \int_0^L \tilde{w}^T g \tilde{q} - \alpha_0 \int_0^L \left(\frac{\partial \tilde{w}}{\partial x}^T L \frac{\partial \tilde{w}}{\partial x} \right) dx \quad (2.4.33)$$

avec la constante positive α_0 (qui est la plus petite valeur propre de L).

Démonstration. Avec les relations (2.4.32), la dynamique de la disponibilité devient :

$$\frac{dA}{dt} = [\tilde{F}^T \tilde{w}]_0^L - \int_0^L g \tilde{q} dx - \int_0^L \left(\frac{\partial \tilde{w}}{\partial x}^T L \frac{\partial \tilde{w}}{\partial x} + \tilde{w}^T K \tilde{w} \right) dx \quad (2.4.34)$$

Avec l'hypothèse que L est définie positive nous avons $\frac{\partial \tilde{w}}{\partial x}^T L \frac{\partial \tilde{w}}{\partial x} \geq \alpha_0 \frac{\partial \tilde{w}}{\partial x}^T \frac{\partial \tilde{w}}{\partial x}$ avec α_0 la plus petite valeur propre de L . Nous avons aussi $\tilde{w}^T K \tilde{w} \geq 0$. \square

Remarque 2.4. *Un objectif de commande sera de choisir les variables de commande à la frontière et la commande distribuée q de telle sorte :*

$$[\tilde{F}^T \tilde{w}]_0^L - \int_0^L \tilde{w} g \tilde{q} dx \leq 0 \quad (2.4.35)$$

2.4.5.2 Cas linéaire avec convection

A notre connaissance, ce cas n'a pas été étudié dans la littérature. On a

$$\frac{dA}{dt} = [\tilde{w}^T \tilde{F}]_0^L - \int_0^L \left(\frac{\partial \tilde{w}}{\partial x}^T \tilde{F}_d \right) dx - \int_0^L \left(\frac{\partial \tilde{w}}{\partial x}^T \tilde{F}_{conv} \right) dx - \int_0^L \tilde{w}^T (\tilde{R} + g\tilde{q}) dx \quad (2.4.36)$$

Si on examine en particulier le terme concernant la convection, on a avec la relation de Gibbs Duhem (1.2.55) :

$$\begin{aligned} \int_0^L \left(\frac{\partial \tilde{w}}{\partial x}^T \tilde{F}_{conv} \right) dx &= \int_0^L \left(\frac{\partial \tilde{w}}{\partial x}^T v(z - z_d) \right) dx \\ &= \int_0^L v \left(-\frac{\partial w_d}{\partial x}^T z - \frac{\partial w}{\partial x}^T z_d \right) dx \end{aligned} \quad (2.4.37)$$

Ce terme n'a pas de signe défini.

Proposition 3. *Sous les hypothèses :*

1. $\tilde{w}, \tilde{z} \in H^1([0, 1], \mathbb{R}^3)$ l'espace de Sobolev des fonctions faiblement dérivables
2. La matrice L est définie positive avec $\frac{\partial \tilde{w}}{\partial x}^T L \frac{\partial \tilde{w}}{\partial x} \geq \alpha_0 \frac{\partial \tilde{w}}{\partial x}^T \frac{\partial \tilde{w}}{\partial x}$
3. $\tilde{w}(z(t, 0)) = 0$

le système avec convection

$$\frac{\partial \tilde{z}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \tilde{F} + \tilde{R} + g\tilde{q}$$

avec les lois linéaires (2.4.32) est strictement passif si $v < \frac{\alpha_0}{2\nu_0}$ où $\nu_0 = \sup_{||x||=1} \frac{x^T Q^{-1} x}{x^T x}$.

Démonstration. Reprenons à partir du terme de convection de l'équation (2.4.36) :

$$-\int_0^L \left(\frac{\partial \tilde{w}}{\partial x}^T \tilde{F}_{conv} \right) dx = -\int_0^L v \frac{\partial \tilde{w}}{\partial x}^T \tilde{z} dx$$

Avec la propriété 2.8, $\tilde{w} = -Q\tilde{z}$ avec Q est une matrice définie positive. Nous pouvons écrire

$$-\int_0^L \left(\frac{\partial \tilde{w}}{\partial x}^T \tilde{F}_{conv} \right) dx = \int_0^L v \frac{\partial \tilde{w}}{\partial x}^T Q^{-1} \tilde{w} dx \quad (2.4.38)$$

Avec l'inégalité de Cauchy Schwartz, nous obtenons :

$$\left| -\int_0^L \left(\frac{\partial \tilde{w}}{\partial x}^T \tilde{F}_{conv} \right) dx \right| \leq v \left\| Q^{-1} \frac{\partial \tilde{w}}{\partial x} \right\|_{L^2[0,1]} \|\tilde{w}\|_{L^2[0,1]} \quad (2.4.39)$$

où $\|f(x)\|_{L^2[0,1]}^2 = \int_0^1 f^T f dx$.

Avec l'inégalité de Poincaré-Friedrichs [74] nous pouvons borner $\|\tilde{w}\|_{L^2[0,1]}$ par :

$$\|\tilde{w}\|_{L^2[0,1]} \leq 2 \left(\tilde{w}(0)^T \tilde{w}(0) + \left\| \frac{\partial \tilde{w}}{\partial x} \right\|_{L^2[0,1]} \right) \quad (2.4.40)$$

Avec l'hypothèse que les conditions frontières soient telles que $\tilde{w}(z(t, 0)) = 0$, nous obtenons :

$$-\int_0^L \left(\frac{\partial \tilde{w}}{\partial x}^T \tilde{F}_{conv} \right) dx \leq 2v\nu_0 \left\| \frac{\partial \tilde{w}}{\partial x} \right\|_{L^2[0,1]}^2 \quad (2.4.41)$$

avec $\nu_0 = \sup_{||x||=1} \frac{x^T Q^{-1} x}{x^T x}$.

Il s'ensuit que

$$\frac{\partial A}{\partial t} \leq [\tilde{F}^T \tilde{w}]_0^L - \int_0^L \tilde{w}^T g\tilde{q} - \alpha_0 \int_0^L \left(\frac{\partial \tilde{w}}{\partial x}^T \frac{\partial \tilde{w}}{\partial x} \right) dx + 2v\nu_0 \int_0^L \left(\frac{\partial \tilde{w}}{\partial x}^T \frac{\partial \tilde{w}}{\partial x} \right) dx \quad (2.4.42)$$

□

2.4.6 Illustration de la disponibilité en boucle ouverte

Nous traçons avec les conditions opératoires décrites dans la section précédente la disponibilité locale avec différentes valeurs numériques de vitesse de convection v . Elle est tracée avec z_d correspondant au profil d'équilibre à vitesse v donnée. Les figures 2.4.1 et 2.4.2 montrent

l'évolution temporelle de la disponibilité locale a pour $v = 0.01, 0.005, 0.003, 0.001$ à différentes coordonnées spatiales x .

Comme attendu toutes les courbes locales convergent vers 0, ce qui montre que les cinq systèmes convergent vers leurs profils d'équilibre respectifs.

Nous constatons que pour certaines vitesses de convection $v = 0.01, 0.005, 0.003$, que la disponibilité ne convergent pas uniformément. Plus la vitesse de convection est grande, plus l'amplitude des rebonds est importante. Le point d'amplitude maximale du rebond correspond à la coordonnée spatiale où la réaction chimique a le plus d'intensité. Par ailleurs nous remarquons que les valeurs numériques de a sont les plus grandes pour $v = 0.03$; c'est à cette vitesse que la réaction est la plus active. Pour des vitesses très lentes ou très rapides ce rebond est inexistant et correspond dans les deux cas à une réaction chimique faible avec des valeurs numériques de a relativement faible.

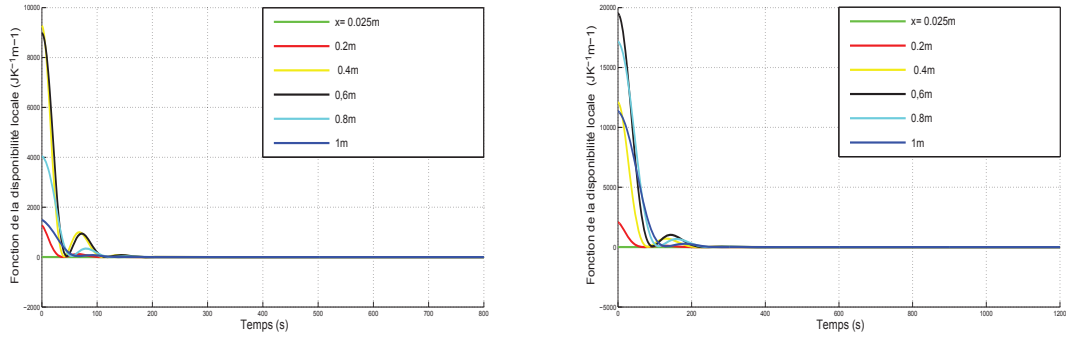


FIGURE 2.4.1 – La disponibilité locale avec $v = 0.01m/s$ et $v = 0.005m/s$

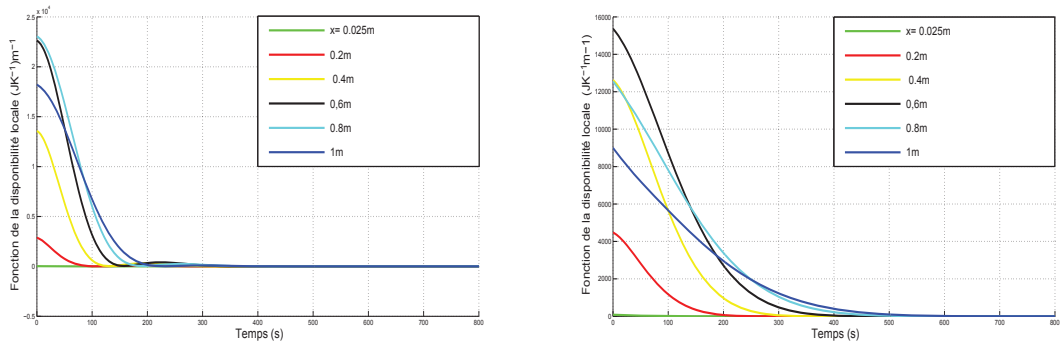


FIGURE 2.4.2 – La disponibilité locale avec $v = 0.003m/s$ et $v = 0.001m/s$

La figure 2.4.3 montre l'évolution temporelle de la disponibilité globale à différentes vitesse de convection. Le rebond est encore présent. Par ailleurs nous avons tracé en Figure 2.4.4 la disponibilité globale dans le cas sans convection. Les conditions aux frontières pour ce cas sont

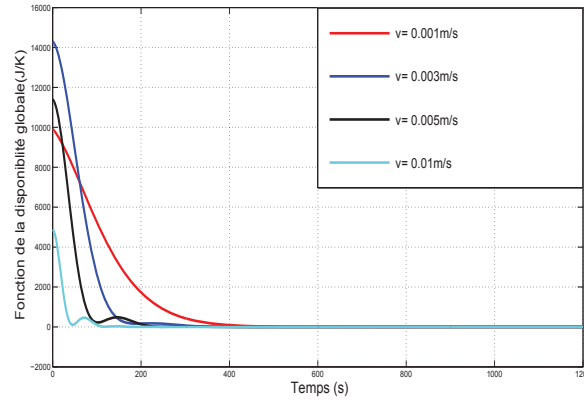


FIGURE 2.4.3 – La disponibilité globale à différentes vitesses de convection

données en annexe. Nous notons bien l'absence de rebond alors que la réaction est active.

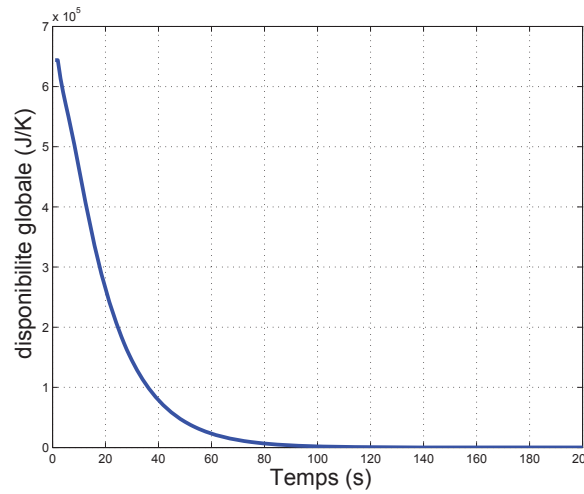


FIGURE 2.4.4 – La disponibilité globale sans convection

2.5 La fonction de disponibilité réduite en dimension finie

Dans [47] dans le cas d'un mélange idéal à pression constante, les auteurs ont proposé de décomposer la fonction de disponibilité en vision entropique en deux contributions : la première correspond à la contribution thermique $A_r(Z)$ et la seconde à la contribution due au mélange $A_m(Z)$.

$$A(Z) = A_r(Z) + A_m(Z) \text{ avec } Z^T = \left(H N_A N_B \right) \quad (2.5.1)$$

Ils ont alors utilisé la fonction A_r comme fonction de Lyapunov candidate pour la synthèse de commande stabilisante d'un RPAC. Nous donnons par la suite le nom de *disponibilité*

réduite à ce terme. Dans cette section, nous allons rappeler la définition de A_r dans le cas d'un mélange idéal et nous donnerons ses principales propriétés ainsi que celle de A_m .

Définition 2.6. La disponibilité réduite en vision entropique A_r est définie par :

$$A_r(Z) = -\tilde{w}_r^T Z \quad (2.5.2)$$

Le vecteur \tilde{w}_r est définie comme $\tilde{w}_r = w_r - w_{r_d}$ où $w_r = \left(w_H = \frac{1}{T} \quad w_{r_A} \quad w_{r_B} \right)^T$ et $w_{r_d} = w_r(Z_d)$ avec

$$w_{r_i} = -c_{p_i} + \frac{1}{T}(c_{p_i}T_{ref} - h_{iref}) + c_{p_i} \ln\left(\frac{T}{T_{ref}}\right) + s_{iref} \quad (2.5.3)$$

pour $i = A, B$.

Remarque 2.5. Les variables intensives réduites w_{r_A} et w_{r_B} sont déduites à partir de l'expression des potentiels chimiques à pression constante (avec $P = P_{ref}$) dans un mélange idéal :

$$\mu_i = \mu_{i0}(T) + RT \ln(x_i) \quad (2.5.4)$$

avec

$$\mu_{i0} = c_{p_i}(T - T_{ref}) + h_{iref} - c_{p_i}T \ln\left(\frac{T}{T_{ref}}\right) - T s_{iref} \quad (2.5.5)$$

où x_i est la fraction molaire du constituant i , l'indice ref correspond à l'état thermodynamique de référence [29] et c_{p_i} correspond à la capacité calorifique de l'espèce i .

Nous avons :

$$-\frac{\mu_i}{T} = -\frac{\overbrace{\mu_{i0}}^{w_{r_i}}}{T} - R \ln(x_i) \quad (2.5.6)$$

Nous obtenons ainsi :

$$\tilde{w}_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{T} - \frac{1}{T_d} \\ (\frac{1}{T} - \frac{1}{T_d})(c_{p_A}T_{ref} - h_{Aref}) + c_{p_A} \ln\left(\frac{T}{T_d}\right) \\ (\frac{1}{T} - \frac{1}{T_d})(c_{p_B}T_{ref} - h_{Bref}) + c_{p_B} \ln\left(\frac{T}{T_d}\right) \end{pmatrix} \quad (2.5.7)$$

2.5.1 Propriétés

Propriété 2.10. [47, 17]

1. Sous l'hypothèse que le nombre total de moles est différent de 0, la disponibilité réduite A_r est positive et s'annule sur le sous espace défini par : $H + N_A(c_{p_A}T_{ref} - h_{Aref} - c_{p_A}T_d) + N_B(c_{p_B}T_{ref} - h_{Bref} - c_{p_B}T_d) = 0$.
2. A_r est convexe.

Démonstration. A partir de l'expression (2.5.2) de A_r et de (2.5.7), avec l'enthalpie totale $H = \sum_1^n h_i N_i$ $h_i = c_{p_i}(T - T_{ref}) + h_{iref}$, la disponibilité réduite A_r s'écrit :

$$A_r = -\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_d}\right) \sum_1^n [c_{p_i}(T - T_{ref}) + h_{iref}] N_i \\ - \sum_1^n \left(\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_d}\right) (c_{p_i} T_{ref} - h_{iref}) + c_{p_i} \ln\left(\frac{T}{T_d}\right) \right) N_i$$

Nous en déduisons l'expression suivante :

$$A_r = -\left(1 - \frac{T}{T_d} + \ln\left(\frac{T}{T_d}\right)\right) C_p \quad (2.5.8)$$

avec la capacité calorifique totale $C_p = c_{p_A} N_A + c_{p_B} N_B$

– Le nombre de moles par espèce est positif et la capacité calorifique molaire d'une phase homogène est toujours positive [72]. Ainsi la capacité calorifique totale C_p est aussi positive avec l'hypothèse que le nombre de moles total est différent de 0.

– La fonction $\eta(y) = -(1 - y + \ln(y))$ où $y = \frac{T}{T_d}$ est positive dans l'intervalle $T > 0, T_d > 0$.

Nous en concluons que la fonction de la disponibilité A_r est positive.

Remarque 2.6. Par ailleurs nous avons que η est définie positive par rapport à T avec un minimum à 0 pour $T = T_d$. A_r est donc convexe par rapport à T .

Nous rappelons l'expression de la température T en fonction des variables d'état :

$$T = \frac{H - N_A(h_{A_{ref}} - c_{p_A} T_{ref}) - N_B(h_{B_{ref}} - c_{p_B} T_{ref})}{c_{p_A} N_A + c_{p_B} N_B} \quad (2.5.9)$$

La disponibilité réduite s'annule pour $T = T_d$:

$$T_d = \frac{H - N_A(h_{A_{ref}} - c_{p_A} T_{ref}) - N_B(h_{B_{ref}} - c_{p_B} T_{ref})}{c_{p_A} N_A + c_{p_B} N_B} \quad (2.5.10)$$

Nous en déduisons que la disponibilité s'annule sur un sous espace de l'espace d'état satisfaisant (2.5.11) :

$$H + N_A(c_{p_A} T_{ref} - h_{A_{ref}} - c_{p_A} T_d) + N_B(c_{p_B} T_{ref} - h_{B_{ref}} - c_{p_B} T_d) = 0 \quad (2.5.11)$$

Pour montrer que A_r est convexe par rapport à Z , nous calculons le hessien de A_r : H_{es} . Si le hessien H_{es} est défini positif alors la disponibilité réduite sera convexe.

Posons $\beta_A = (h_{A_{ref}} - c_{p_A} T_{ref})$, $\beta_B = (h_{B_{ref}} - c_{p_B} T_{ref})$ et $\gamma = \beta_A c_{p_B} - \beta_B c_{p_A}$.

A partir de l'expression de A_r suivante :

$$A_r = -\left(1 - \frac{\frac{H - N_A \beta_A - N_B \beta_B}{c_{p_A} N_A + c_{p_B} N_B}}{T_d} + \ln\left(\frac{\frac{H - N_A \beta_A - N_B \beta_B}{c_{p_A} N_A + c_{p_B} N_B}}{T_d}\right)\right) (c_{p_A} N_A + c_{p_B} N_B) \quad (2.5.12)$$

Nous obtenons :

$$H_{es} = \frac{1}{(H - N_A\beta_A - N_B\beta_B)^2} \begin{pmatrix} C_p & -(Hc_{p_A} + N_B\gamma) & -(Hc_{p_B} + N_A\gamma) \\ -(Hc_{p_A} + N_B\gamma) & \frac{(Hc_{p_A} + N_B\gamma)^2}{C_p} & \frac{(Hc_{p_A} + N_B\gamma)(Hc_{p_B} + N_A\gamma)}{C_p} \\ -(Hc_{p_B} + N_A\gamma) & \frac{(Hc_{p_A} + N_B\gamma)(Hc_{p_B} + N_A\gamma)}{C_p} & \frac{(Hc_{p_B} + N_A\gamma)^2}{C_p} \end{pmatrix} \quad (2.5.13)$$

Par calcul, le hessien a deux valeurs propres nulles et la valeur propre suivante :

$$\frac{C_p^2 + (hc_{p_A} + N_B\gamma)^2 + (hc_{p_B} + N_A\gamma)^2}{C_p(N_A\beta_A + N_B\beta_B - h)^2} \quad (2.5.14)$$

Il est facile de vérifier que la troisième valeur propre est positive, ainsi nous concluons que la fonction de la disponibilité réduite A_r est convexe mais pas strictement convexe par rapport à Z car nous avons deux valeurs propres nulles. La direction de convexité correspond à la température.

□

La partie matérielle de la fonction de la disponibilité A_m est définie :

$$A_m = -\tilde{w}_m^T Z \quad (2.5.15)$$

$$\text{Avec } w_m^T = \begin{pmatrix} 0 & -R\ln(x_A) & -R\ln(x_B) \end{pmatrix}$$

Propriété 2.11. [47][17] A_m possède les propriétés suivante :

1. A_m est une fonction convexe.
2. A_m est une fonction homogène de degré 1 par rapport à N .
3. Sous l'hypothèse que le nombre total de moles est différent de 0, A_m est positive.

Démonstration. A partir de (2.5.15) nous avons :

$$A_m = R \sum_{i=A,B} \ln\left(\frac{N_i N_{T_d}}{N_{i_d} N_T}\right) N_i \quad (2.5.16)$$

ou encore :

$$A_m = R \overbrace{\sum_{i=A,B} \ln\left(\frac{N_i}{N_T}\right) N_i}^{\vartheta} - R \sum_{i=A,B} \ln\left(\frac{N_{i_d}}{N_{T_d}}\right) N_i \quad (2.5.17)$$

où $N_T = N_{T_d} = N_A + N_B$ est le nombre de moles total.

Nous calculons le hessien de A_m par rapport à Z :

$$H_{A_m} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 A_m}{\partial H^2} = 0 & \frac{\partial^2 A_m}{\partial H \partial N_A} = 0 & \frac{\partial^2 A_m}{\partial H \partial N_B} = 0 \\ \frac{\partial^2 A_m}{\partial N_A \partial H} = 0 & \frac{\partial^2 A_m}{\partial N_A^2} = \frac{N_B R}{N_A(N_A + N_B)} & \frac{\partial^2 A_m}{\partial N_A \partial N_B} = -\frac{R}{N_A + N_B} \\ \frac{\partial^2 A_m}{\partial N_B \partial H} = 0 & \frac{\partial^2 A_m}{\partial N_B \partial N_A} = -\frac{R}{N_A + N_B} & \frac{\partial^2 A_m}{\partial N_B^2} = \frac{N_A R}{N_B(N_A + N_B)} \end{pmatrix} \quad (2.5.18)$$

Par calcul, le hessien a deux valeurs propres nulles et une valeur propre égale à $\frac{R(N_A^2 + N_B^2)}{N_A N_B (N_A + N_B)}$. Il est évident que la troisième valeur propre est définie positive donc le hessien est semi défini positif. Ainsi A_m est convexe par rapport à Z mais pas strictement convexe.

Nous considérons

$$\vartheta = R \sum_{i=A,B} \ln\left(\frac{N_i}{N_T}\right) N_i \quad (2.5.19)$$

Pour montrer que A_m est une fonction homogène de degré 1 par rapport à N il suffit de montrer qu'on peut écrire que

$$A_m = \frac{\partial A_m}{\partial N}^T N, \quad N^T = \begin{pmatrix} N_A & N_B \end{pmatrix} \quad (2.5.20)$$

Pour cela nous calculons $\frac{\partial A_m}{\partial N}$ ou plus simplement $\frac{\partial \vartheta}{\partial N_i}$ car le second terme est linéaire en N_i :

$$\frac{\partial \vartheta}{\partial N_i} = R \ln\left(\frac{N_i}{N_T}\right) \quad (2.5.21)$$

Il s'ensuit que l'on peut écrire A_m sous la forme (2.5.20) et donc A_m est une fonction homogène de degré 1 par rapport à N .

A_m est la distance D entre le plan tangent de la fonction ϑ passant par N_d et ϑ . Cette distance s'écrit :

$$D = \vartheta - \left(\frac{\partial \vartheta}{\partial N}\right)|_{N=N_d} (N - N_d) + \vartheta \geq 0 \quad (2.5.22)$$

et donc nous obtenons de par la convexité de la fonction ϑ :

$$A_m = D = \vartheta - \frac{\partial \vartheta}{\partial N}|_{N=N_d} N \geq 0 \quad (2.5.23)$$

□

2.6 La fonction de disponibilité réduite en dimension infinie

Pour l'analyse de commande des systèmes à paramètres distribués, nous développons la notion de la disponibilité réduite en dimension infinie.

2.6.1 Formulation locale de la disponibilité réduite

En dimension infinie, les variables locales sont des densités. Ainsi la fonction locale de la disponibilité réduite s'écrit :

$$a_r(z(x, t)) = -(w_r(x, t) - w_{r_d}(x))^T z(x, t) \quad (2.6.1)$$

On définit pour la fonction de la disponibilité réduite :

$$A_r = \int_0^L a_r dx = \int_0^L a_{r_f} \quad (2.6.2)$$

où $a_{r_f} = a_r dx$

Et nous avons la forme différentielle :

$$a_{r_f} = -(w_r(x, t) - w_{r_d}(x))^T z_f \quad (2.6.3)$$

2.6.2 Propriété

Propriété 2.12. *La forme différentielle a_{r_f} est une fonction homogène de degré 1 par rapport à z*

$$a_{r_f}(\gamma z, \gamma z_d) = \gamma a_{r_f}(z, z_d) \quad (2.6.4)$$

La démonstration de cette propriété est identique pour la homogénéité de fonction de la disponibilité originale (cf propriété 2.6).

Propriété 2.13. *La fonction de la disponibilité réduite locale a_r*

1. *Dans la cas où ρ est différent de 0, a_r est positive.*

2. *S'annule sur le sous espace défini par :*

$$T = T_d \Leftrightarrow h + (c_{pA}(T_{ref} - T_d) - h_{A_{ref}})\rho_A + (c_{pB}(T_{ref} - T_d) - h_{B_{ref}})\rho_B = 0$$

3. *a_r est convexe.*

La démonstration de cette propriété est identique à celle de la propriété 2.10.

2.6.3 La dynamique de la disponibilité réduite locale et globale

La fonction de la disponibilité réduite globale est obtenue en intégrant la forme locale, soit :

$$A_r(t) = \int_0^L a_r dx = \int_0^L -\tilde{w}_r(x, t)^T z(x, t) dx \quad (2.6.5)$$

Proposition 4. *La dérivée temporelle de la fonction de la disponibilité réduite est donnée par :*

$$\frac{\partial a_r}{\partial t} = -\tilde{w}_r^T \frac{\partial z}{\partial t} \quad (2.6.6)$$

Démonstration. La fonction de la disponibilité réduite est définie :

$$a_r = -\tilde{w}_r^T z \quad (2.6.7)$$

en appliquant la dérivée matérielle, nous avons donc :

$$\begin{aligned}
\frac{Da_r}{Dt} &= -\tilde{w}_r^T \frac{Dz}{Dt} - \frac{D\tilde{w}_r^T}{Dt} z \\
&= -\tilde{w}_r^T \frac{Dz}{Dt} - \left(\left(\frac{Dw_r}{Dt} \right)^T z - \left(\frac{\partial w_{rd}}{\partial t} \right)^T z - v \left(\frac{\partial w_{rd}}{\partial x} \right)^T z \right) \\
&= -\tilde{w}_r^T \frac{Dz}{Dt} + v \left(\frac{\partial w_{rd}}{\partial x} \right)^T z - \left(\frac{Dw_r}{Dt} \right)^T z
\end{aligned} \tag{2.6.8}$$

Par définition, nous avons $w = w_r + w_m$ avec $w_m = \begin{pmatrix} 0 & w_{m_A} & w_{m_B} \end{pmatrix}^T$. La relation du Gibbs-Duhem donne :

$$\frac{Dw^T}{Dt} z = \frac{Dw_r^T}{Dt} z + \frac{Dw_m^T}{Dt} z = 0 \tag{2.6.9}$$

La partie matérielle s'écrit $w_{m_i} = -R \ln(\theta_i)$

$$\begin{aligned}
\frac{Dw_r^T}{Dt} z &= -\frac{Dw_m^T}{Dt} z \\
&= -\left(\left(\frac{\partial w_m}{\partial t} \right)^T z - v \left(\frac{\partial w_m}{\partial x} \right)^T z \right) \\
&= R \frac{1}{\theta_A} \frac{\partial \theta_A}{\partial t} \rho \theta_A + R \frac{1}{\theta_B} \frac{\partial \theta_B}{\partial t} \rho \theta_B - v \left(\frac{\partial w_m}{\partial x} \right)^T z \\
&= R \left(\frac{\partial \theta_A}{\partial t} + \frac{\partial \theta_B}{\partial t} \right) - v \left(\frac{\partial w_m}{\partial x} \right)^T z \\
&= -v \left(\frac{\partial w_m}{\partial x} \right)^T z
\end{aligned} \tag{2.6.10}$$

Comme $\frac{Dw_r}{Dt} z \neq 0$, nous avons :

$$\begin{aligned}
\frac{Da_r}{Dt} &= -\tilde{w}_r^T \frac{Dz}{Dt} + v \left(\frac{\partial w_{rd}}{\partial x} \right)^T z - \left(\frac{Dw_r}{Dt} \right)^T z \\
\frac{Da_r}{Dt} &= -\tilde{w}_r^T \frac{Dz}{Dt} + v \left(\frac{\partial w_{rd}}{\partial x} \right)^T z + v \left(\frac{\partial w_m}{\partial x} \right)^T z \\
\frac{\partial a_r}{\partial t} &= -\tilde{w}_r^T \frac{Dz}{Dt} + v \left(\frac{\partial w_{rd}}{\partial x} \right)^T z + v \left(\frac{\partial w_m}{\partial x} \right)^T z - v \left(\frac{\partial a_r}{\partial x} \right)^T z \\
&= -\tilde{w}_r^T \frac{Dz}{Dt} + v \left(\frac{\partial w_{rd}}{\partial x} \right)^T z + v \left(\frac{\partial w_m}{\partial x} \right)^T z + v \left(\frac{\partial \tilde{w}_r}{\partial x} \right)^T z + v \tilde{w}_r \frac{\partial z}{\partial x} \\
&= -\tilde{w}_r^T \frac{\partial z}{\partial t} + v \left(\frac{\partial w_{rd}}{\partial x} \right)^T z + v \left(\frac{\partial w_m}{\partial x} \right)^T z + v \left(\frac{\partial \tilde{w}_r}{\partial x} \right)^T z \\
&= -\tilde{w}_r^T \frac{\partial z}{\partial t} + v \left(\frac{\partial w}{\partial x} \right)^T z
\end{aligned} \tag{2.6.11}$$

Nous avons démontré au chapitre 1 que $v \left(\frac{\partial w}{\partial x} \right)^T z = 0$, donc $\frac{\partial a_r}{\partial t} = -\tilde{w}_r^T \frac{\partial z}{\partial t}$

□

Avec la dynamique du système $\frac{\partial z}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} F + R + gq$ (1.5.6), nous avons donc la dynamique de la disponibilité réduite globale suivante :

$$\frac{dA_r(t)}{dt} = - \int_0^L \tilde{w}_r^T (R + gq) dx + \int_0^L \tilde{w}_r^T \frac{\partial F}{\partial x} dx \tag{2.6.12}$$

2.6.4 Illustration de la disponibilité réduite locale en boucle ouverte

Nous traçons avec les conditions opératoires décrites dans la section précédente la disponibilité réduite locale avec différentes valeurs numériques de vitesse de convection v . Elle est tracée avec z_d correspondant au profil d'équilibre relatif à v . Les figures 2.6.1 et 2.6.2 montrent l'évolution temporelle de la disponibilité réduite locale a_r pour $v = 0.01, 0.005, 0.003, 0.001$ à différentes coordonnées spatiales x .

Comme attendu toutes les courbes locales convergent vers 0, ce qui montre que dans tous les cas le système converge vers son profil d'équilibre.

Les résultats obtenus sont très semblables aux résultats de simulation de la disponibilité thermodynamique avec cependant des valeurs beaucoup plus faibles.

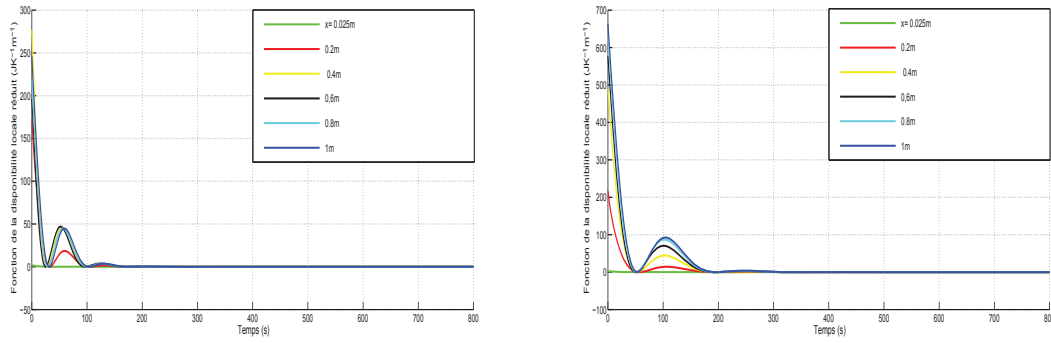


FIGURE 2.6.1 – La disponibilité réduite locale avec $v = 0.01m/s$ et $v = 0.005m/s$

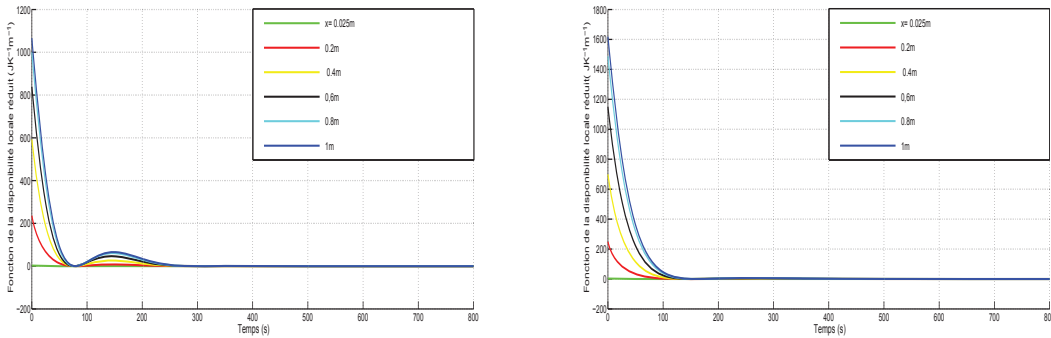
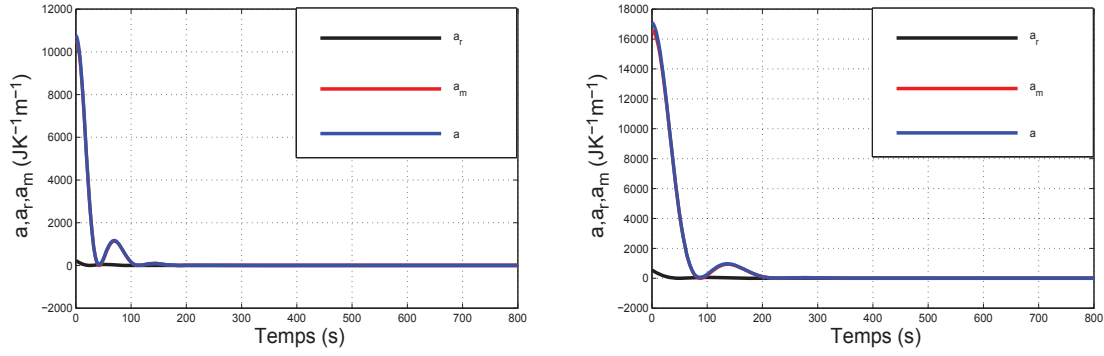
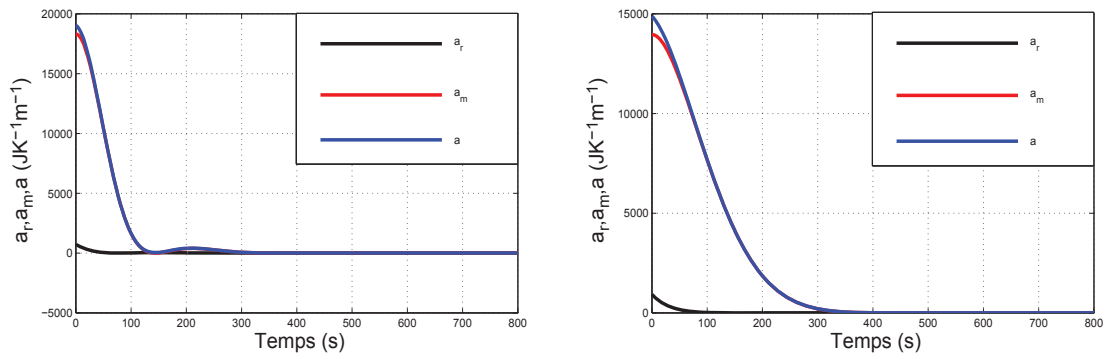


FIGURE 2.6.2 – La disponibilité réduite locale avec $v = 0.003m/s$ et $v = 0.001m/s$

Les figures (2.6.3) et (2.6.4) montrent en même temps l'évolution temporelle de la disponibilité a , de la disponibilité réduite a_r et de la partie matérielle a_m à la coordonnée $x = 0.5m$ pour $v = 0.01, 0.005, 0.003, 0.001$.

FIGURE 2.6.3 – La disponibilité réduite locale avec $v = 0.01\text{m/s}$ et $v = 0.005\text{m/s}$ FIGURE 2.6.4 – La disponibilité réduite locale avec $v = 0.003\text{m/s}$ et $v = 0.001\text{m/s}$

2.7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons donné les principales propriétés des fonctions de disponibilité et de disponibilité réduite en dimension finie et infinie et infinie. Ces deux fonctions seront utilisées dans le chapitre suivant pour la synthèse de loi de commande stabilisante du réacteur tubulaire.

Chapitre 3

Commande stabilisante distribuée du réacteur tubulaire

3.1 Mes contributions

La contribution principale dans ce chapitre est la synthèse de cinq lois de commande non linéaires distribuées permettant de stabiliser le réacteur tubulaire vers un profil d'équilibre désiré. Nous avons considéré pour cela la température de la double enveloppe comme entrée de commande effective du système. La synthèse de ces lois de commande est basée sur une approche thermodynamique à partir d'un modèle en vision entropique. Plus précisément, nous utilisons la disponibilité thermodynamique et la disponibilité réduite, définies à partir de la fonction d'entropie comme une fonction de Lyapunov candidate pour la synthèse des lois de commandes (voir chapitre 2).

Nous allons aussi montrer que ces lois de commande permettent de rejeter certaines perturbations sur le système. Cette propriété sera illustrée pour une perturbation sur la température d'entrée du réacteur.

L'approche adoptée ici pour la synthèse des différentes lois de commande est une extension des travaux de Hoang et al. [44, 47], où les auteurs ont utilisé la disponibilité thermodynamique et la disponibilité réduite en dimension finie pour la stabilisation d'un RPAC.

Nous présentons aussi dans ce chapitre une application d'une commande quasi-distribuée (uniforme par morceau) le long du réacteur, donnée comme une moyennisation de commandes distribuées. Enfin nous proposons une loi de commande stabilisante uniforme le long du réacteur en utilisant la disponibilité réduite comme fonction de Lyapunov.

3.2 Bibliographie sur la commande des réacteurs et position du problème

Le réacteur tubulaire étant un système à paramètres distribués, modélisé par des équations aux dérivées partielles. Nous distinguons deux familles d’approches adoptées pour la stabilisation du réacteur. La première est l’approche basée sur un modèle de dimension finie issu de la discrétisation des équations aux dérivées partielles. La deuxième approche est celle basée sur le modèle en dimension infinie du réacteur tubulaire. Dans la suite nous présenterons pour les deux familles d’approche un certain nombre de travaux de recherche concernant la commande du réacteur tubulaire. Nous commencerons cette section bibliographique par un aperçu des travaux concernant la commande du Réacteur Parfaitement Agité Continu.

3.2.1 Commande du RPAC : bibliographie

Le modèle du RPAC est donné par les équations des différents bilans de masse pour les espèces considérés ainsi que le bilan d’énergie. Certaines hypothèses sont souvent rajoutées au modèle telles que l’enthalpie de réaction ou la capacité calorifique totale supposées constantes. D’un point de vue commande, on trouve dans la littérature plusieurs travaux traitant le problème de stabilisation du réacteur en utilisant soit des approches linéaires [13, 8, 9, 10] ou non linéaires. Dans ces dernières nous pouvons retrouver des approches de commande basées sur des fonctions de Lyapunov [11, 47], des approches de commande par retour d’état non linéaire couplée avec un observateur [51], des approches basées sur la passivité [69, 45, 68] ou des approches basées sur les techniques de modelage de puissance [37].

Notamment dans [47], la fonction de disponibilité thermodynamique a été utilisée comme fonction de Lyapunov candidate pour la stabilisation du réacteur.

3.2.2 Commande du Réacteur tubulaire : bibliographie

Nous retrouvons dans la littérature beaucoup de travaux de recherche traitant de la commande du réacteur chimique tubulaire. Dans cette sous-section, nous allons présenter une classification des différentes stratégies de commandes synthétisées selon le problème de commande considéré, les méthodes de synthèse mais aussi les modèles utilisés dans la synthèse.

3.2.2.1 Classification des problèmes du commandes

Les problèmes de commande formulés pour le réacteur tubulaire peuvent être caractérisés par le choix des variables de commande (actionnement du système) ainsi que les variables ou grandeurs commandées. D’un point de vue des variables de commande nous distinguons principalement la commande distribuée et les commandes aux frontières du réacteur.

Dans le cas de la commande distribuée, la température de la double enveloppe est souvent considérée comme entrée de commande effective du système. Cette entrée de commande distri-

buée permet de commander le flux de chaleur échangé entre le réacteur et le fluide calo-porteur de la double enveloppe. Bien que le caractère distribué de cet actionnement du système reste loin d'être réalisable en pratique, il est souvent choisi pour la commande du réacteur [83].

Concernant la commande frontière, les entrées de commande sont multiples et parmi ces possibilités nous pouvons citer les débits d'alimentation des espèces chimiques, leur concentration d'alimentation, mais aussi leur température d'admission dans le réacteur [33, 34, 19, 48, 23].

Les variables commandées sont soit le profil de température et/ou les profils de concentration des espèces chimiques le long du réacteur. Le profil d'équilibre désiré est souvent choisi comme étant le profil instable (dans le cas où il existe) car il représente en général un bon compromis entre rendement de la réaction et une température de réaction pas trop élevée [43, 42, 23].

3.2.2.2 Classification des méthodes de synthèse et des modèles utilisés

Naturellement, nous retrouvons les deux familles de modèles, à savoir les modèles de dimension infinie (EDPs) et les modèles de dimension finie obtenus soit par une simplification du modèle original ou par discrétisation spatiale. Pour les deux familles de modèle, nous pouvons aussi décliner les classes de modèles non linéaires et les classes de modèles linéaires obtenus soit par linéarisation ou bien en considérant directement des lois phénoménologiques linéaires. Dans la suite nous allons présenter quelques travaux pour les deux familles de modèles.

La démarche classique utilisée pour résoudre le problème de commande consiste à discrétiser spatialement les équations aux dérivées partielles par une méthode d'approximation afin d'obtenir un système de dimension finie représenté par des équations différentielles ordinaires. Nous pouvons citer en dimension finie des travaux obtenus à partir de schémas de discrétisation tels que les différences finies [23], les collocations orthogonales [60] ou la décomposition orthogonale aux valeurs propres [22, 1]. Nous ajoutons à cela le fait que les lois constitutives des différents phénomènes dans le réacteur tubulaire sont fortement non linéaires. Ces non linéarités, en plus du caractère distribué du système, complexifient le problème de commande. Nous pouvons citer [39, 2, 83] pour la synthèse de lois de commande linéaires, [23] pour la commande par *Backstepping*, [14, 12, 33, 34] pour la commande par retours d'état non linéaires.

Il existe aussi beaucoup de travaux de recherche qui proposent des lois de commande en se basant sur le modèle EDPs. Parmi les premiers travaux nous pouvons citer [27] pour la méthode de placement de pôles du système de dimension infinie et [18] pour une commande de dimension infinie approchée par une commande de dimension finie. Pour la commande du réacteur tubulaire en utilisant le modèle à paramètres distribués, dans [50] et [49] nous trouvons la synthèse de lois de commande adaptative basée sur une fonction de Lyapunov proposée pour le système de dimension infinie et cela pour le cas d'un réacteur piston (convection et

réaction). Le problème de stabilisation du réacteur tubulaire a aussi été abordé par l'approche de la commande optimale [3] dans laquelle un modèle linéarisé du réacteur tubulaire à été utilisé. Dans [66] nous trouvons une approche de commande composée d'un retour d'état non linéaire couplée avec un observateur synthétisé en dimension infinie.

3.2.3 Commande par inventaires des réacteurs

Le concept de commande des réacteurs par inventaires proposé dans [36] consiste à considérer des quantités globales (intégrales) extensives (additives) et bornées inférieurement, appelées inventaires, qui induisent la passivité du système vis à vis d'un certain couple d'entrées-sorties (qui ne sont pas forcément les entrées-sorties naturelles du système). La stabilisation de ces inventaires autour d'un point d'équilibre permettent indirectement de stabiliser le système autour d'un profil d'équilibre. Sous certaines hypothèses d'inversibilité, la commande effective du système peut être calculée.

3.3 Position du problème de commande

L'objectif de commande que nous considérons ici est la stabilisation d'un réacteur tubulaire autour d'un profil d'équilibre en utilisant la température de la double enveloppe comme entrée de commande distribuée. Ce profil d'équilibre est à la fois défini pour la température et pour les fractions massiques des espèces A et B le long du réacteur. Nous rappelons le modèle du réacteur tubulaire obtenu dans la vision entropique, donné dans le chapitre 1 :

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} = -\frac{\partial F_{conv}^h}{\partial x} - \rho \frac{\partial F_{cond}^h}{\partial x} - \frac{\partial F_{dis}^h}{\partial x} + q \quad (3.3.1)$$

$$\rho \frac{\partial \theta_A}{\partial t} = -\frac{\partial F_{conv}^A}{\partial x} - \frac{\partial F_{dis}^A}{\partial x} - r \quad (3.3.2)$$

$$\rho \frac{\partial \theta_B}{\partial t} = -\frac{\partial F_{conv}^B}{\partial x} - \frac{\partial F_{dis}^B}{\partial x} + r \quad (3.3.3)$$

Cet ensemble d'équations s'écrit sous la forme compacte suivante :

$$\frac{\partial z}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(\overbrace{F_{conv} + F_d}^F \right) + R + gq \quad (3.3.4)$$

où $z = \begin{pmatrix} h & \rho_A & \rho_B \end{pmatrix}^T$ est le vecteur d'état formé par les variables extensives correspondant, respectivement, à la densité d'enthalpie et aux concentrations massiques des deux espèces considérées. F est le vecteur du flux total décomposé en deux parties : $F_{conv}^T = \begin{pmatrix} v h & v \rho_A & v \rho_B \end{pmatrix}$ représentant le vecteur du flux de convection et $F_d^T = \begin{pmatrix} F_{dis}^h + F_{cond} & F_{dis}^A & F_{dis}^B \end{pmatrix}$ représentant le flux de dispersion et de dispersion thermique. $R^T = \begin{pmatrix} 0 & -r & r \end{pmatrix}$ est le vecteur de la réaction chimique. $g = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}^T$ et q est le flux de chaleur échangé avec l'extérieur via la double enveloppe.

A ce modèle nous associons les conditions aux frontières ainsi que le modèle d'interface définis dans la section 1.7. Nous rappelons aussi la dynamique de la fonction de disponibilité le long des trajectoires du système, donnée préalablement dans (2.4.28) :

$$\frac{dA(z)}{dt} = - \int_0^L \tilde{w}^T (R + gq) dx + \int_0^L \tilde{w}^T \frac{\partial F}{\partial x} dx \quad (3.3.5)$$

Avec $\tilde{w}^T = w^T - w_d^T = \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_d} \quad -\frac{\mu_A}{T} + \frac{\mu_{A_d}}{T_d} \quad -\frac{\mu_B}{T} + \frac{\mu_{B_d}}{T_d} \right)$, où T_d, μ_{A_d} et μ_{B_d} sont, respectivement la température désirée et les potentiels chimiques désirés des espèces A et B . La dynamique (3.3.5) de la disponibilité peut être aussi réécrite comme suit :

$$\frac{dA(z)}{dt} = \int_0^L \tilde{w}^T \left(\frac{\partial F}{\partial x} - R \right) dx - \int_0^L \tilde{w}_h q dx \quad (3.3.6)$$

Où nous avons utilisé la relation $\tilde{w}^T g = \tilde{w}_h = \frac{1}{T} - \frac{1}{T_d}$.

3.4 Synthèse de commandes stabilisantes utilisant la disponibilité thermodynamique

Nous présentons ici la synthèse de lois de commande stabilisantes pour le modèle du réacteur tubulaire en utilisant la disponibilité globale $A(z)$ comme fonction de Lyapunov candidate. Nous déclinons deux différentes lois de commande correspondant à deux choix possibles de la dynamique affectée à $A(z)$ en boucle fermée en utilisant la température de la double enveloppe T_j comme entrée de commande distribuée. Nous noterons dans la suite le profil d'équilibre désiré par $z_d = \begin{pmatrix} h_d & \rho_{A_d} & \rho_{B_d} \end{pmatrix}^T$ et $\tilde{z}^T = (z - z_d)^T = \begin{pmatrix} h - h_d & \rho_A - \rho_{A_d} & \rho_B - \rho_{B_d} \end{pmatrix}$ le vecteur d'erreur de stabilisation :

Proposition 5. *Le système (3.3.4) en boucle fermée avec la loi de commande suivante pour T_j :*

$$T_{j1} = \frac{\left[\tilde{w}^T \frac{\partial F}{\partial x} - \tilde{w}^T R + \tilde{z}^T K(z) \tilde{z} \right]}{C \tilde{w}_h} + T(x) \quad (3.4.1)$$

est globalement asymptotiquement stable en z_d dès que $K(z)$ une matrice symétrique définie positive.

Démonstration. En utilisant l'expression de la commande (3.4.1) dans l'équation constitutive du flux de chaleur q nous obtenons :

$$q := C(T_{j1} - T) = \frac{\left[\tilde{w}^T \frac{\partial F}{\partial x} - \tilde{w}^T R + \tilde{z}^T K(z) \tilde{z} \right]}{\tilde{w}_h} \quad (3.4.2)$$

En remplaçant l'expression du flux de chaleur q dans la dynamique de la la fonction de disponibilité (3.3.6) nous obtenons :

$$\frac{dA(z)}{dt} = - \int_0^L \tilde{z}^T K(z) \tilde{z} dx \Rightarrow \begin{cases} \frac{dA(z)}{dt} < 0, \forall z \neq z_d \\ \frac{dA(z)}{dt} = 0, z = z_d \end{cases} \quad (3.4.3)$$

En utilisant la propriété 2.7 et la positivité de $A(z)$ nous pouvons écrire, le long de la dynamique en boucle fermée, les relations suivantes :

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} A(z) = 0 &\Rightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} a(z) = 0 \quad \forall x \in [0, L] \\ &\Rightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} z = z_d. \end{aligned} \quad (3.4.4)$$

Ainsi la fonction $A(z)$ est une fonction de Lyapunov dont la variation est définie négative le long des des trajectoires du système en boucle fermée. Elle ne s'annule qu'au profil d'équilibre désiré z_d . Le système (3.3.4) en boucle fermée avec la loi de commande 3.4.1 est donc globalement asymptotiquement stable en z_d . \square

Remarque 3.1. La commande (3.4.1) fait apparaître une division par \tilde{w}_h . Le caractère bien posé (la convergence à une valeur finie) reste à démontrer quand $\tilde{w}_h \rightarrow 0$

Proposition 6. Le système (3.3.4) en boucle fermée avec la loi de commande suivante pour T_j :

$$T_{j2} = \frac{\left[\tilde{w}^T \frac{\partial F}{\partial x} - \tilde{w}^T R + K(z)a(z) \right]}{C\tilde{w}_h} + T(x) \quad (3.4.5)$$

est globalement asymptotiquement stable en z_d avec $K(z)$ une fonction positive de z

Démonstration. En utilisant l'expression de la commande (3.4.5) dans l'équation constitutive du flux de chaleur q nous obtenons :

$$q := C(T_{j2} - T) = \frac{\left[\tilde{w}^T \frac{\partial F}{\partial x} - \tilde{w}^T R + K(z)a(z) \right]}{\tilde{w}_h} \quad (3.4.6)$$

En remplaçant l'expression du flux de chaleur q dans la dynamique de la la fonction de disponibilité (3.3.6) nous obtenons :

$$\frac{dA(z)}{dt} = - \int_0^L K(z)a(z)dx \quad (3.4.7)$$

Nous avons par ailleurs dans la propriété 2.7 :

$$\begin{cases} a(z) > 0, \forall z \neq z_d \\ a(z) = 0, z = z_d \end{cases} \quad (3.4.8)$$

Nous déduisons que :

$$\frac{dA(z)}{dt} = - \int_0^L K(z)a(z)dx \Rightarrow \begin{cases} \frac{dA(z)}{dt} < 0, \forall z \neq z_d \\ \frac{dA(z)}{dt} = 0, z = z_d \end{cases} \quad (3.4.9)$$

Le long de la dynamique du système en boucle fermée, nous pouvons écrire comme pour la proposition (5) ce qui suit :

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} A(z) = 0 &\Rightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} a(z) = 0 \quad \forall x \in [0, L] \\ &\Rightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} z = z_d. \end{aligned} \quad (3.4.10)$$

La fonction $A(z)$ est donc une fonction de Lyapunov pour le système (3.3.4) en boucle fermée avec la loi de commande (3.4.5) et le système en boucle fermée est globalement asymptotiquement stable en z_d . \square

3.4.1 Résultat de simulation

Nous présentons dans cette section des résultats de simulation concernant les réponses temporelles du système en boucle fermée avec la loi de commande T_{j_1} donnée par (3.4.1) ensuite avec T_{j_2} donnée par (3.4.5).

Le profil d'équilibre désiré, autour duquel nous voulons stabiliser le système, est celui correspondant aux conditions opératoires suivantes :

$$\begin{aligned} T_j &= 370K \quad \forall x \in [0, L] \\ T_{in} &= 330K \\ \theta_{A_{in}} &= 1 \end{aligned} \quad (3.4.11)$$

Le système est initialisé au profil d'équilibre correspondant à $T_j = 350K$ pour tout $x \in [0, L]$, avec les mêmes conditions aux frontières données dans (3.4.11). Pour la loi de commande T_{j_1} , nous proposons les valeurs suivantes pour la matrice $K(x, t)$:

$$K(x, t) = \begin{pmatrix} K_1(x, t) & 0 & 0 \\ 0 & \frac{K_1(x, t)}{100} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{K_1(x, t)}{100} \end{pmatrix} \quad (3.4.12)$$

Avec $K_1(x, t)$ donné par :

$$K_1(x, t) = \min\{\delta \exp^{-\frac{x}{2}} + \delta v t (1 - \exp^{-\frac{x}{2}}), \delta\} \quad (3.4.13)$$

où v est la vitesse de convection et δ une constante positive.

Remarque 3.2. Ce choix particulier de matrice K s'avère intéressant car, comme nous le montrerons dans la suite, il permet d'obtenir des amplitudes et des variations de commandes

admissibles. Il est basé sur l'évolution spatiale de $K_1(x, t)$ à partir d'un profil initial par un déplacement dans le sens de l'écoulement à la même vitesse que le flux de convection. Comme on l'observe dans sa définition, ce profil du gain est par définition saturé à une valeur égale à δ . Nous avons numériquement vérifié que δ doit être inférieur ou égal à 6000. Au-delà de cette valeur seuil nous avons observé des problèmes numériques.

Nous présentons d'abord les résultats de simulations en utilisant la commande T_{j_1} donnée dans 3.4.1 avec $\delta = 6000$. L'évolution temporelle et spatiale de l'erreur entre la température T à l'intérieur du réacteur et son profil d'équilibre T_d ainsi que la fraction massique θ_B et son profil d'équilibre θ_{B_d} en boucle fermée sont présentés dans la figure 3.4.1. Comme nous pouvons l'observer, ces erreurs convergent globalement et asymptotiquement vers zéro ce qui implique la convergence globale et asymptotique des variables d'état z vers le profil d'équilibre désiré z_d .

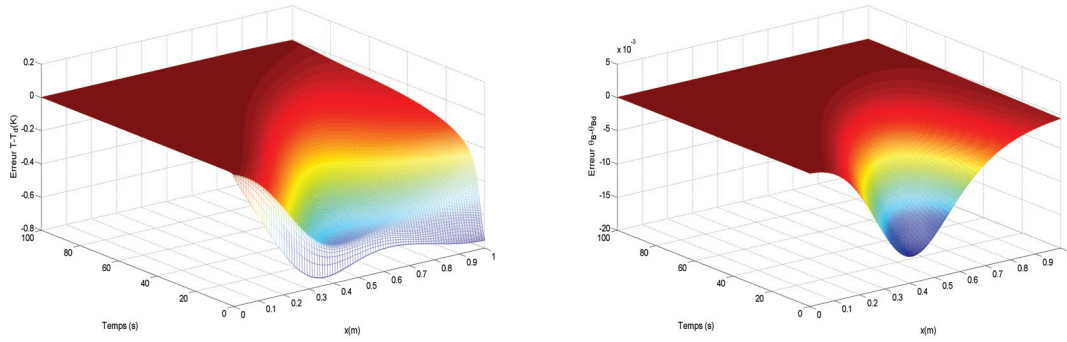


FIGURE 3.4.1 – Erreurs de stabilisation pour T et θ_B en boucle fermée avec la commande T_{j_1}

La figure 3.4.2 montre l'évolution temporelle et spatiale de la température de la double enveloppe, qui est l'entrée de commande distribuée du système.

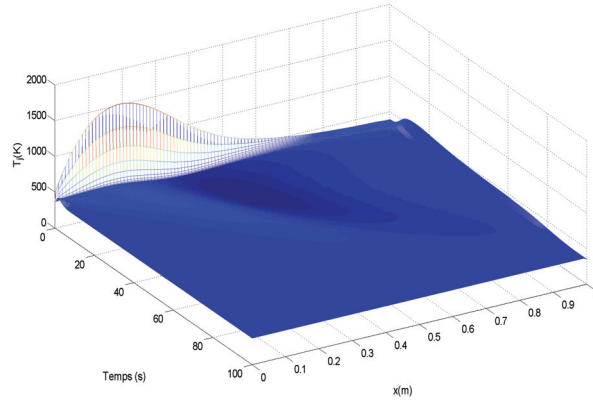


FIGURE 3.4.2 – La commande T_{j_1}

Nous remarquons que le système en boucle fermée converge plus vite que le système en boucle ouverte vers les profils d'équilibre z_d (voir figure (1.8.1) du chapitre 1) . Précisément, le temps de réponse en boucle fermée est à peu près 100s au lieu de 200s en boucle ouverte. L'amplitude de la température de la double enveloppe reste très élevée pendant le régime transitoire.

La figure 3.4.3 montre l'évolution temporelle et spatiale de la fonction de disponibilité locale. Nous remarquons qu'elle converge globalement et asymptotiquement vers zéro le long du réacteur tubulaire. La figure 3.4.4 présente l'évolution temporelle la fonction disponibilité globale qui converge asymptotiquement vers zéro.

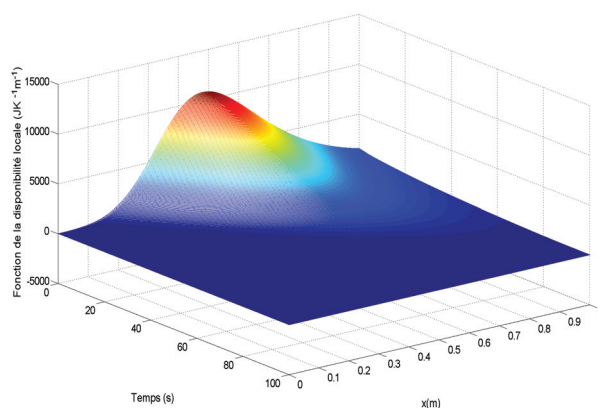


FIGURE 3.4.3 – La disponibilité locale en boucle fermée avec la commande T_{j_1}

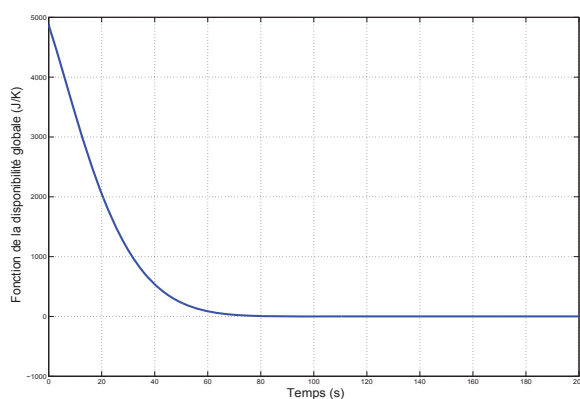
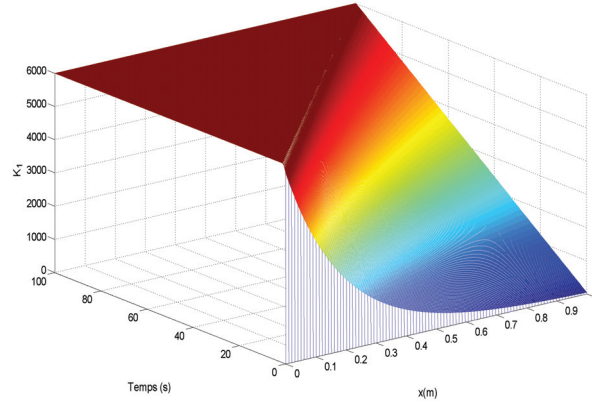


FIGURE 3.4.4 – La disponibilité globale en boucle fermée avec la commande T_{j_1}

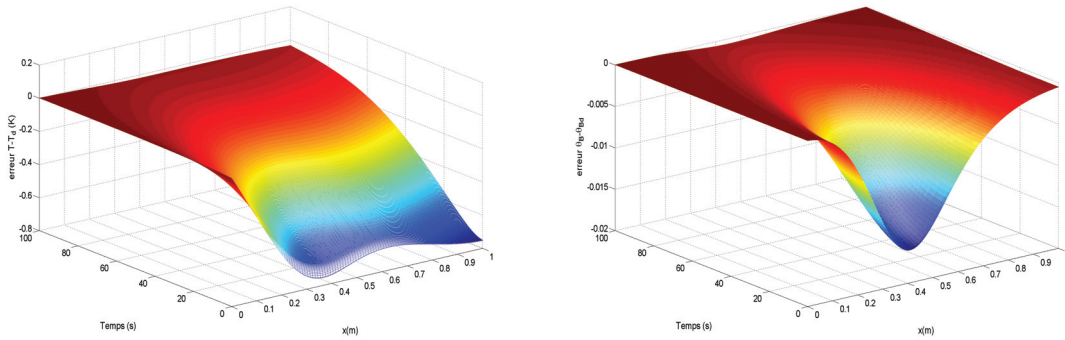
La figure 3.4.5 montre l'évolution temporelle et spatiale du gain $K_1(x, t)$.

Nous présentons maintenant les résultats de simulation du système en boucle fermée avec

FIGURE 3.4.5 – Le gain K_1

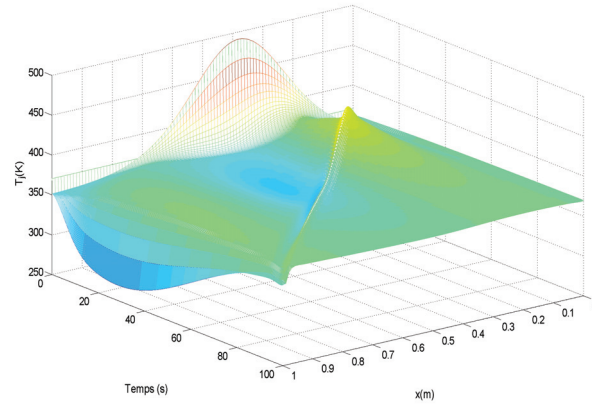
le retour d'état T_{j_2} donné dans la Proposition 6. Nous présenterons cela pour le même scénario que celui utilisé avec T_{j_1} (profil initial et profil d'équilibre désiré).

Nous utiliserons pour le gain K la même expression donnée pour K_1 dans (3.4.13) avec $\delta = 0.08$. L'évolution temporelle et spatiale de l'erreur entre la température T à l'intérieur du réacteur et son profil d'équilibre T_d ainsi que la fraction massique θ_B et son profil de équilibre θ_{B_e} en boucle fermée sont présentées dans la figure(3.4.6). Comme nous pouvons l'observer, ces erreurs tendent vers zéro ce qui implique la convergence des variables d'état z globalement et asymptotiquement vers le profil d'équilibre désiré z_d .

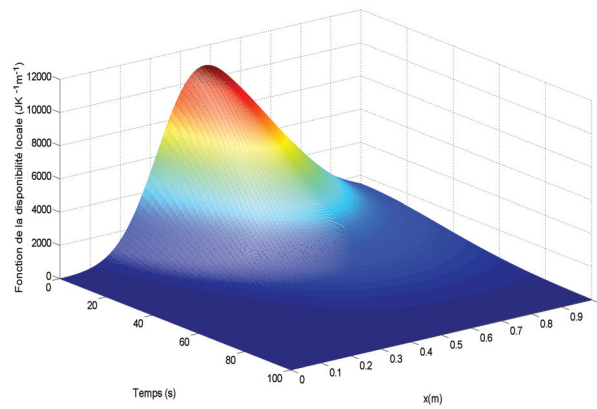
FIGURE 3.4.6 – Erreurs de stabilisation pour T et θ_B en boucle fermée avec la commande T_{j_2}

La figure 3.4.7 montre l'évolution temporelle et spatiale de la température de la double enveloppe, qui est l'entrée de commande distribuée du système.

Nous pouvons noter une diminution importante de l'amplitude de la température de la double enveloppe T_{j_2} comparativement à celle obtenue avec T_{j_1} . Par exemple, au début de la simulation nous constatons que le pic en $x = 0.2m, t = 0.1s$ est approximativement $500K$ au lieu de $1500K$ avec T_{j_1} .

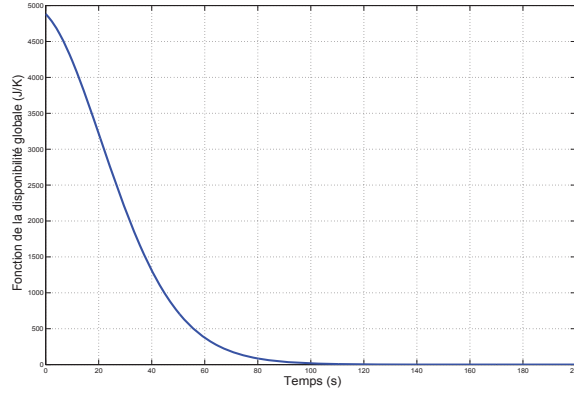
FIGURE 3.4.7 – La commande T_{j_2}

La figure 3.4.8 montre l'évolution temporelle et spatiale de la fonction de disponibilité locale. Nous remarquons qu'elle converge asymptotiquement vers zéro le long du réacteur tubulaire. La figure 3.4.9 présente l'évolution temporelle de la fonction disponibilité globale, qui converge asymptotiquement vers zéro.

FIGURE 3.4.8 – La disponibilité locale en boucle fermée avec la commande T_{j_2}

3.5 Commande stabilisante avec la disponibilité réduite

Dans cette section, nous proposons deux autres lois de commande, toujours sous la forme d'un retour d'état non-linéaire. Nous utilisons pour cela la fonction de la disponibilité réduite A_r (2.6.2) introduite dans le chapitre 2 comme fonction de Lyapunov à la place de la fonction de disponibilité A . Comme nous allons le voir, l'usage de la fonction de disponibilité réduite nous permettra d'améliorer considérablement les performances en terme de temps de stabilisation mais aussi de diminuer l'amplitude et les variations de l'entrée de commande, à savoir

FIGURE 3.4.9 – La disponibilité globale avec la commande T_{j_2}

la température de la double enveloppe, durant le régime transitoire. Nous rappelons d'abord l'expression de la dynamique de A_r le long des trajectoires du système (3.3.4) :

$$\begin{aligned} \frac{dA_r(t)}{dt} &= - \int_0^L \tilde{w}_r^T (R + gq) dx + \int_0^L \tilde{w}_r^T \frac{\partial F}{\partial x} dx \\ &= \int_0^L \tilde{w}_r^T \left(\frac{\partial F}{\partial x} - R \right) dx - \int_0^L \tilde{w}_h q dx \end{aligned} \quad (3.5.1)$$

Où nous avons utilisé la relation $\tilde{w}_r^T g = \tilde{w}_h = \frac{1}{T} - \frac{1}{T_d}$. dans la suite nous considérons l'hypothèse suivante :

Hypothèse 3.1. *Pour une température $T(x)$ à l'équilibre à l'intérieur du réacteur tubulaire correspond une seule répartition des concentrations ρ_A, ρ_B .*

Cette hypothèse a pour conséquence de réduire le sous-espace où la disponibilité réduite locale a_r est nulle, sous espace donné dans la propriété 2.13 :

$$h + (c_{pA}(T_{ref} - T_d) - h_{A_{ref}})\rho_A + (c_{pB}(T_{ref} - T_d) - h_{B_{ref}})\rho_B = 0 \quad (3.5.2)$$

au seul point $z_d = (h_d \rho_{Ad} \rho_{Bd})$.

Nous présenterons dans la suite deux lois de commande sous forme de retour d'état non linéaire en utilisant A_r comme fonction de Lyapunov candidate.

Proposition 7. *Le système (3.3.4) en boucle fermée avec la loi de commande suivante pour T_j :*

$$T_{j3} = \frac{\left[\tilde{w}_r^T \frac{\partial F}{\partial x} - \tilde{w}_r^T R + \tilde{z}^T K(z) \tilde{z} \right]}{C \tilde{w}_h} + T(x) \quad (3.5.3)$$

est globalement asymptotiquement stable en z_d . Avec $K(z)$ une matrice définie positive.

Démonstration. En utilisant l'expression de la commande (3.5.3) dans l'équation constitutive du flux de chaleur q nous obtenons :

$$q := C(T_{j3} - T) = \frac{\left[\tilde{w}_r^T \frac{\partial F}{\partial x} - \tilde{w}_r^T R + \tilde{z}^T K(z) \tilde{z} \right]}{\tilde{w}_h} \quad (3.5.4)$$

En remplaçant l'expression du flux de chaleur q dans la dynamique de la fonction disponibilité réduite (3.5.1) nous obtenons :

$$\frac{dA_r(z)}{dt} = - \int_0^L \tilde{z}^T K(z) \tilde{z} dx \Rightarrow \begin{cases} \frac{dA_r(z)}{dt} < 0, \forall z \neq z_d \\ \frac{dA_r(z)}{dt} = 0, z = z_d \end{cases} \quad (3.5.5)$$

Donc $A_r(z)$ est une fonction de Lyapunov pour le système en boucle fermée. Nous déduisons la convergence de A_r vers 0, le long des trajectoires du système en boucle fermée. En tenant compte de la (semi-)positivité de a_r (voir propriété 2.13) nous pouvons écrire que :

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} A_r(z) = 0 &\Rightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} a_r(z) = 0 \quad \forall x \in [0, L] \\ &\Rightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} T = T_d \quad \forall x \in [0, L] \end{aligned} \quad (3.5.6)$$

En utilisant l'hypothèse 3.1 nous pouvons conclure sur la convergence en z_d .

$$\lim_{t \rightarrow \infty} T = T_d \quad \forall x \in [0, L] \Rightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} z = z_d \quad (3.5.7)$$

Nous déduisons ainsi que le système (3.3.4) est globalement asymptotiquement stable en boucle fermée en z_d avec le retour d'état non-linéaire (3.5.3). \square

Proposition 8. *Le système (3.3.4) en boucle fermée avec la loi de commande suivante pour T_j :*

$$T_{j4} = \frac{\left[\tilde{w}_r^T \frac{\partial F}{\partial x} - \tilde{w}_r^T R + K(z) a_r(z) \right]}{C \tilde{w}_h} + T(x) \quad (3.5.8)$$

est globalement asymptotiquement stable en z_d , avec $K(z)$ une fonction strictement positive de z . Cette commande est bien posée.

Démonstration. En utilisant l'expression de la commande (3.5.8) dans l'équation constitutive du flux de chaleur q nous obtenons :

$$q := C(T_{j4} - T) = \frac{\left[\tilde{w}_r^T \frac{\partial F}{\partial x} - \tilde{w}_r^T R + K(z) a_r(z) \right]}{\tilde{w}_h} \quad (3.5.9)$$

En remplaçant l'expression du flux de chaleur q dans la dynamique de la fonction disponibilité réduite (3.5.1), nous obtenons :

$$\frac{dA_r(t)}{dt} = - \int_0^L K(z) a_r(z) dx \quad (3.5.10)$$

avec $K(z)$ une fonction strictement positive de z . Nous avons par ailleurs (voir propriété 2.13)

$$\begin{cases} a_r(z) < 0, \forall T \neq T_d \\ a_r(z) = 0, T = T_d \end{cases} \quad (3.5.11)$$

Rappelons que $T = T_d$ définit un sous espace en z donné dans la propriété 2.13. Nous déduisons ainsi :

$$\frac{dA_r(z)}{dt} = - \int_0^L K(z)a_r(z)dx \Rightarrow \begin{cases} \frac{dA_r(z)}{dt} < 0, \forall T \neq T_d \\ \frac{dA_r(z)}{dt} = 0, T = T_d \end{cases} \quad (3.5.12)$$

Donc $A_r(z)$ est une fonction de Lyapunov pour le système en boucle fermée. Nous déduisons la convergence de A_r vers 0, le long des trajectoires du système en boucle fermée. En tenant compte de la (semi-)positivité de a_r (voir propriété 2.13) nous pouvons écrire que :

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} A_r(z) = 0 & \Rightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} a_r(z) = 0 \quad \forall x \in [0, L] \\ & \Rightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} T = T_d \quad \forall x \in [0, L] \end{aligned} \quad (3.5.13)$$

En utilisant l'hypothèse 3.1 nous pouvons conclure sur la convergence en z_d .

$$\lim_{t \rightarrow \infty} T = T_d \quad \forall x \in [0, L] \Rightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} z = z_d \quad (3.5.14)$$

Nous concluons que le système (3.3.4) est globalement asymptotiquement stable en boucle fermée, avec le retour d'état non-linéaire (3.5.8) en z_d .

Nous cherchons les expressions (asymptotes) des variables intensives w_{rA} et w_{rB} lorsque $T \rightarrow T_d$. Nous pouvons écrire le développement limité du terme $\ln(\frac{T}{T_d})$ autour de $T = T_d$:

$$\ln\left(\frac{T}{T_d}\right) = \ln(1) + \frac{1}{T/T_d}|_{T=T_d} \left(\frac{T}{T_d} - 1\right) = -T\tilde{w}_h \quad (3.5.15)$$

Nous obtenons donc les expressions suivantes autour de $T = T_d$ pour les variables intensives :

$$\tilde{w}_{rA} = \tilde{w}_h(c_{pA}(T_{ref} - T) - h_{Aref}) = \tilde{w}_h h_A \quad (3.5.16)$$

$$\tilde{w}_{rB} = \tilde{w}_h(c_{pB}(T_{ref} - T) - h_{Bref}) = \tilde{w}_h h_B \quad (3.5.17)$$

En remplaçant l'expression des variables intensives \tilde{w}_{rA} et \tilde{w}_{rB} autour de $T = T_d$ dans l'expression de la commande q nous trouvons :

$$q = V^T(\partial_x F - R - Kz) \quad (3.5.18)$$

avec $V^T = (1 \quad h_A \quad h_B)$. La commande q reste donc bornée lorsque $T \rightarrow T_d$.

□

3.5.1 Résultat de simulation

Nous présentons ici des résultats de simulation pour les deux lois de commandes T_{j3} et T_{j4} synthétisées en utilisant la fonction de disponibilité réduite comme fonction de Lyapunov. Nous utiliserons le même profil d'équilibre initial et celui désiré en boucle fermée ainsi que les mêmes conditions aux frontières déjà utilisés pour les commandes T_{j1} et T_{j2} . La même expression pour le gain K sera utilisée dans les deux cas.

Nous présentons d'abord les résultats de simulations en utilisant le retour d'état T_{j3} donné dans la proposition 7 avec K donné par l'expression (3.4.13) où $\delta = 350$. L'évolution temporelle et spatiale de l'erreur entre la température T à l'intérieur du réacteur et son profil d'équilibre T_d ainsi que la fraction massique θ_B et son profil de équilibre θ_{B_d} en boucle fermée sont présentées dans la figure 3.5.1. Comme nous pouvons l'observer, ces erreurs convergent asymptotiquement et globalement vers zéro ; cela implique la convergence des variables d'état z asymptotiquement et globalement vers le profil d'équilibre désiré z_d .

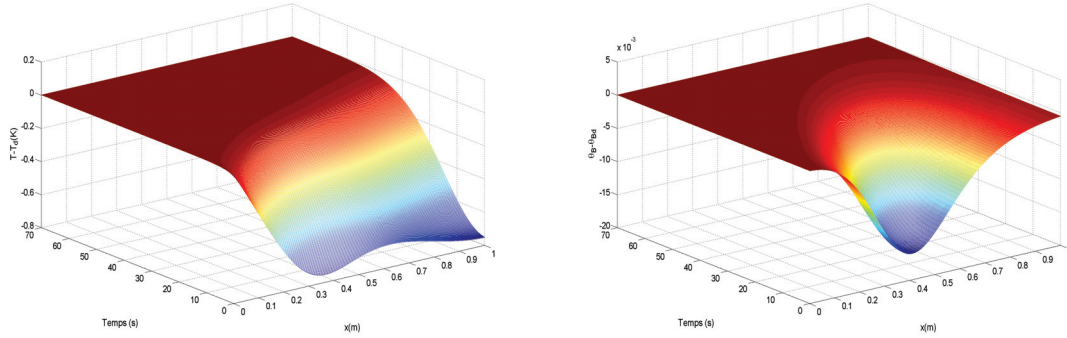
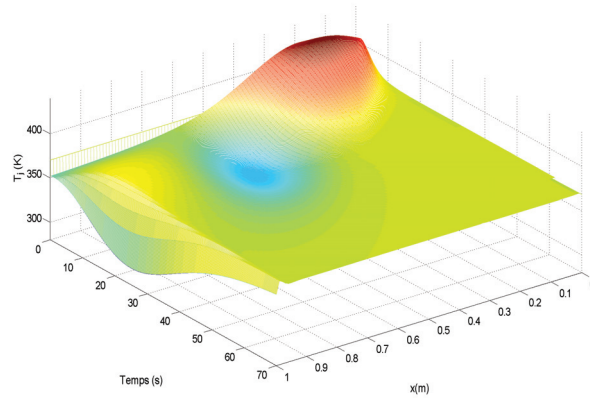
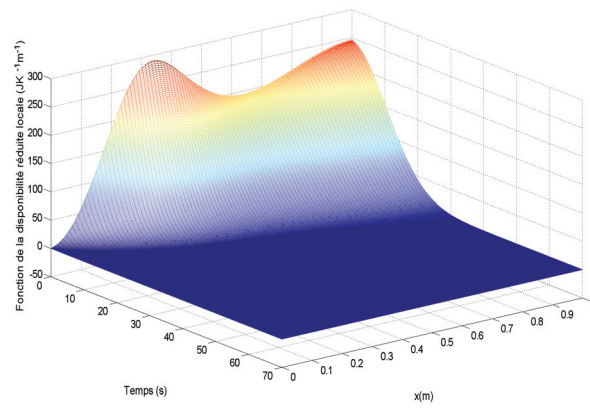
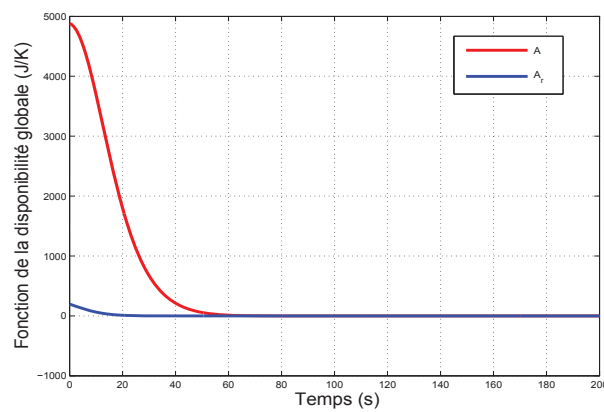


FIGURE 3.5.1 – Erreurs de stabilisation pour T et θ_B en boucle fermée avec la commande T_{j3}

Le système converge globalement et asymptotiquement vers le profil d'équilibre en 60s contre 100s avec T_{j1} . La figure 3.5.2 montre l'évolution temporelle et spatiale de la température de la double enveloppe. Nous remarquons une diminution des l'amplitude ainsi que des variations de T_j .

La figure 3.5.3 montre l'évolution temporelle et spatiale de la fonction de disponibilité réduite locale. Nous remarquons qu'elle converge globalement et asymptotiquement vers zéro le long du réacteur tubulaire avec une forte baisse des amplitudes de a_r par rapport à celles obtenues pour a . La figure 3.5.4 présente l'évolution temporelle de la fonction disponibilité globale A et celle réduite A_r avec la même lois de commande T_{j3} . Nous remarquons que A_r converge plus rapidement vers zéro que A avec aussi une amplitude plus petite par rapport à celle de A .

FIGURE 3.5.2 – La commande T_{j3} FIGURE 3.5.3 – La disponibilité réduite locale a_r en boucle fermée avec la commande T_{j3} FIGURE 3.5.4 – La disponibilité globale A et la disponibilité globale réduite A_r avec la commande T_{j3}

Nous présentons maintenant des résultats de simulation pour le système en boucle fermée avec la loi de commande T_{j4} donnée dans la proposition 8.

L'évolution temporelle de l'erreur entre la température T à l'intérieur du réacteur et son

profil d'équilibre T_d ainsi qu'entre la fraction massique θ_B et son profil de équilibre θ_{B_d} en boucle fermée sont présentées dans la figure 3.5.5 le long du réacteur. Ces erreurs convergent asymptotiquement vers zéro ce qui implique la convergence des variables d'état z globalement et asymptotiquement vers le profil d'équilibre désiré z_d .

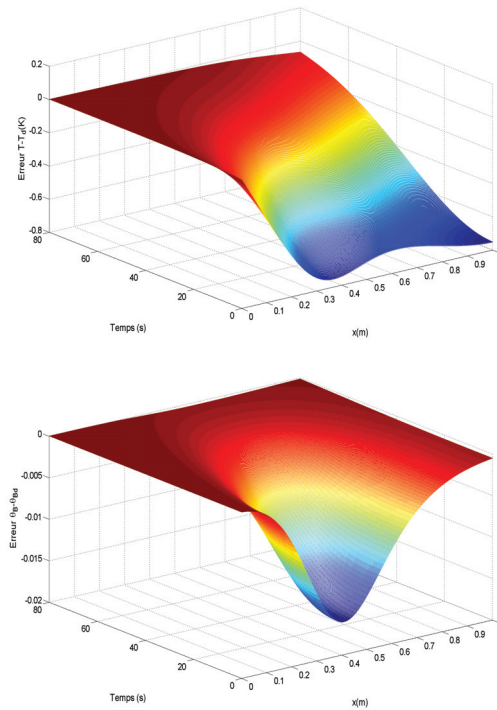
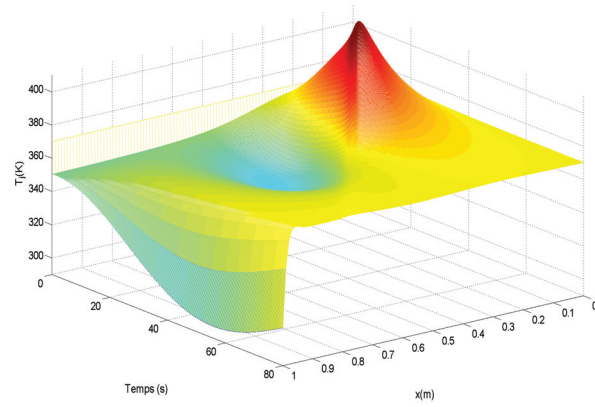
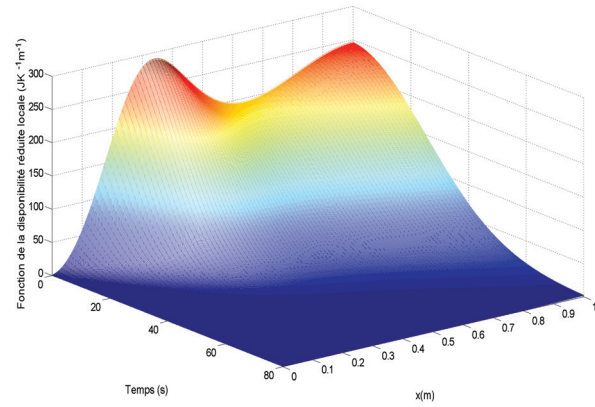
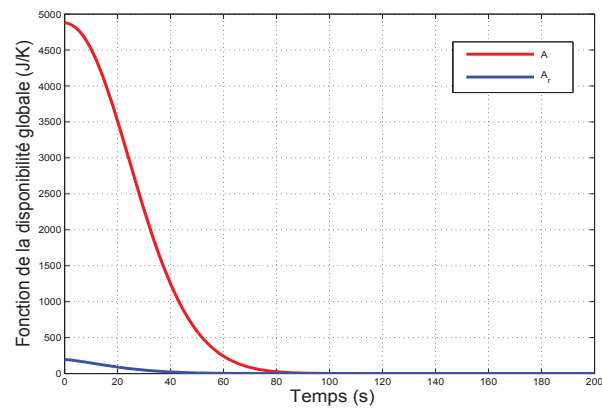


FIGURE 3.5.5 – Erreurs de stabilisation pour T et θ_B en boucle fermée avec la commande T_{j_4}

Nous constatons dans les simulations de la figure 3.5.5 un temps de réponse, approximativement, de 100s. La figure 3.5.6 montre l'évolution temporelle de la température de la double enveloppe le long du réacteur. Nous remarquons des amplitudes similaire à celles de T_{j_3} par contre avec des variations moins brusques.

La figure 3.5.7 montre l'évolution temporelle et spatiale de la fonction de disponibilité réduite locale. Nous remarquons qu'elle converge globalement et asymptotiquement vers zéro le long du réacteur tubulaire avec une forte baisse des amplitudes de a_r par rapport à celles obtenues pour a . La figure 3.5.8 présente l'évolution temporelle la fonction disponibilité globale qui converge asymptotiquement vers zéros.

FIGURE 3.5.6 – La commande T_{j_4} FIGURE 3.5.7 – La disponibilité réduite locale a_r en boucle fermée avec la commande T_{j_4} FIGURE 3.5.8 – La disponibilité globale A et disponibilité globale réduite A_r avec la commande T_{j_4}

3.6 Rejet de perturbation

Nous présentons dans cette section quelques résultats de simulation des précédentes lois de commandes en présence de perturbations. Nous considérons notamment une perturbation sur la température à l'entrée du réacteur à savoir T_{in} . A la place d'une température $T_{in} = 330K$ nous appliquerons $T_{in} = (330 + 1)K$.

Nous commençons d'abord par montrer l'effet de cette perturbation sur le profil d'équilibre en température. La figure 3.6.1 montre cet effet par une erreur entre le profil d'équilibre avec et sans perturbation à $t = 5000s$ de la simulation en boucle ouverte.

Maintenant, en appliquant l'un des quatre retours d'état synthétisés précédemment (par exemple T_{j3} dans le cas présenté ici), nous allons montrer que l'erreur due à la perturbation introduite dans la température d'entrée T_{in} est rejetée. Nous l'observons bien dans la figure 3.6.2 qui montre une erreur nulle entre le profil de température final à l'intérieur du réacteur et du profil de température désiré. Nous concluons donc que la commande appliquée permet de rejeter ce type de perturbation. La figure 3.6.3 montre la température de la double enveloppe pour cette simulation.

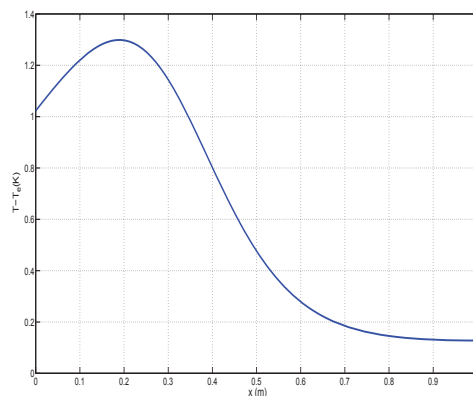


FIGURE 3.6.1 – Erreur entre T et T_d à $t = 5000s$ en boucle ouverte en présence de perturbation

3.7 Approche pratique de la commande distribuée

Nous avons montré précédemment l'efficacité en terme de stabilisation et de rejet de perturbation des lois de commande proposées. Les lois de commande données pour la température de la double enveloppe suppose la capacité de l'appliquer d'une manière distribuée le long du réacteur tubulaire. Tout de même, en pratique nous ne pouvons actionner que par morceau le long de la double enveloppe en utilisant soit un fluide calo-porteur ou bien des résistances chauffantes (par morceau). Pour tenir compte de cela nous proposons deux

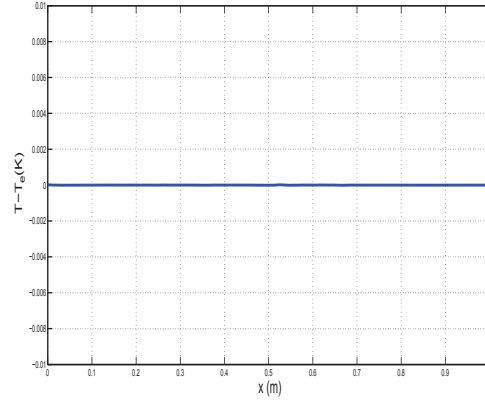


FIGURE 3.6.2 – Erreur entre T et T_d à $t = 5000s$ en boucle fermée en présence de perturbation avec T_{j3}

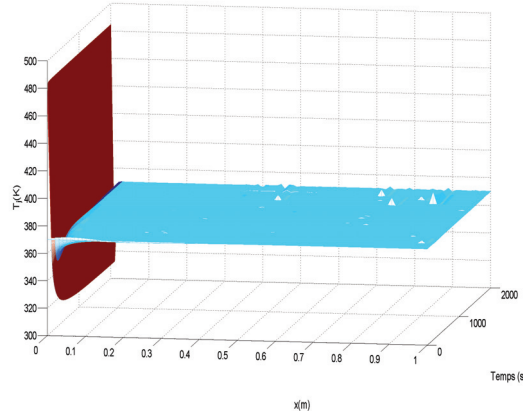


FIGURE 3.6.3 – La commande T_{j3} pour le rejet de perturbation

solutions. La première consiste à procéder à une répartition de la double enveloppe en un certain nombre d'intervalle. Sur chaque intervalle nous appliquerons une température uniforme donnée par la moyenne de la commande obtenue par un retour d'état non linéaire sur le même intervalle. Nous appellerons cette approche "commande quasi-distribuée". La deuxième consiste à synthétiser une commande uniforme le long du réacteur.

3.7.1 Commande quasi-distribuée avec k intervalles

Nous considérons k -intervalles de longueur égale le long de la double enveloppe. La commande appliquée sur chaque intervalle i ($x \in [x_i, x_{i+1}]$), notée $T_j^i(t)$ est donnée par :

$$T_j^i(t) = \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \int_{x_i}^{x_{i+1}} T_j(x, t) dx \quad (3.7.1)$$

où $T_j(x, t)$ est une des quatre lois de commande synthétisées précédemment. Nous illustrons dans la suite le cas avec $k = 5$ en utilisant la loi de commande pour T_j celle de la proposition

7. La figure 3.7.1 présente la réponse temporelle et spatiale de l'erreur de stabilisation pour T et θ_B . Les figures 3.7.2, et 3.7.3 montrent le profil spatial final (à un temps de simulation $t=200s$) de l'erreur de stabilisation pour θ_B et T respectivement. Nous pouvons noter que l'erreur de stabilisation en température est de l'ordre du centième de Kelvin et celle de la fraction θ_B est de l'ordre de 10^{-3} .

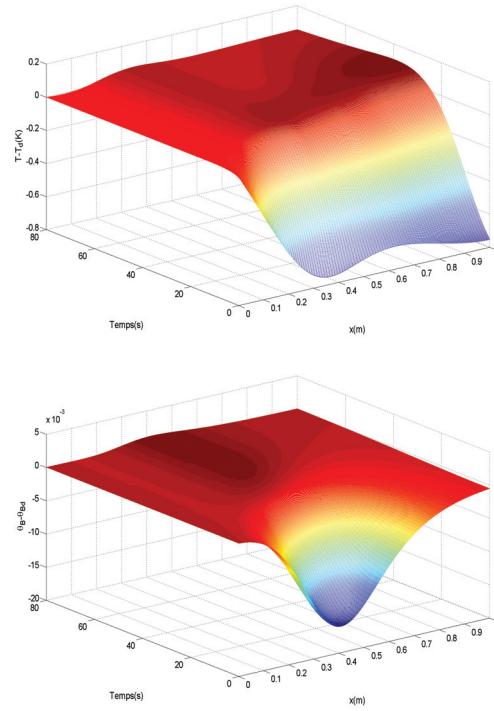


FIGURE 3.7.1 – Erreurs de stabilisation pour T et θ_B en boucle fermée avec la commande T_{j3} appliquée sur 5 intervalles

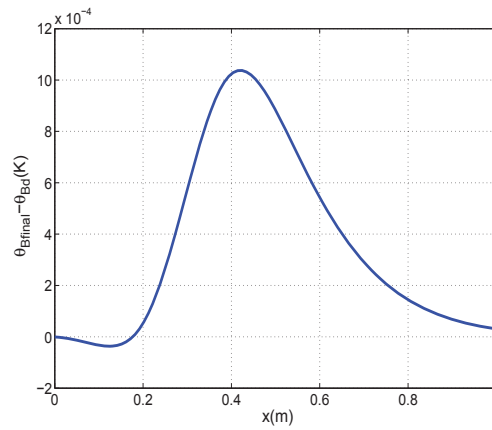
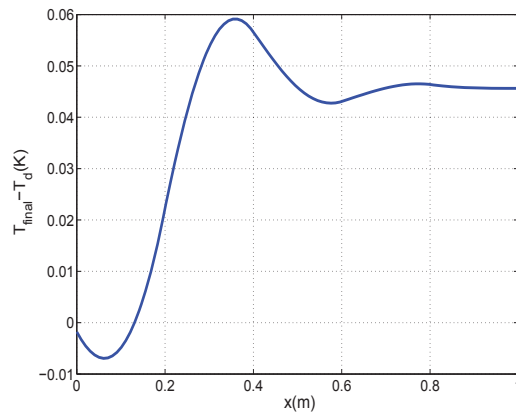
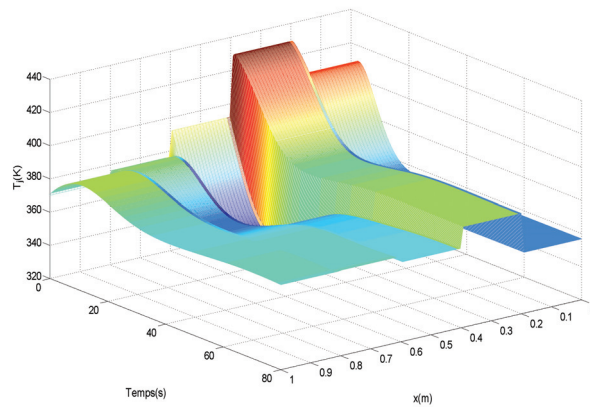


FIGURE 3.7.2 – Profil final de l'erreur entre θ_B et θ_{Bd}

FIGURE 3.7.3 – Profil final de l'erreur entre T et T_d

La figure 3.7.4 montre l'évolution temporelle et spatiale de la température de la double enveloppe appliquée pour les 5 intervalles le long du réacteur.

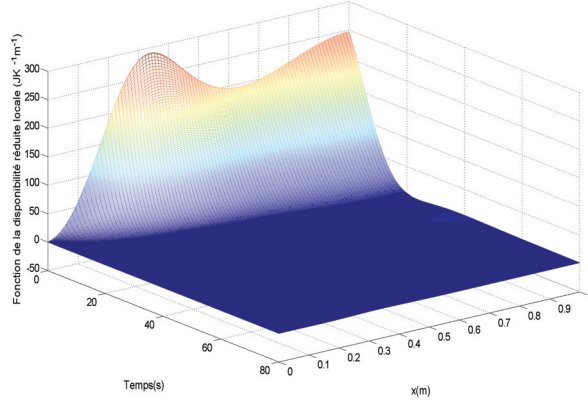
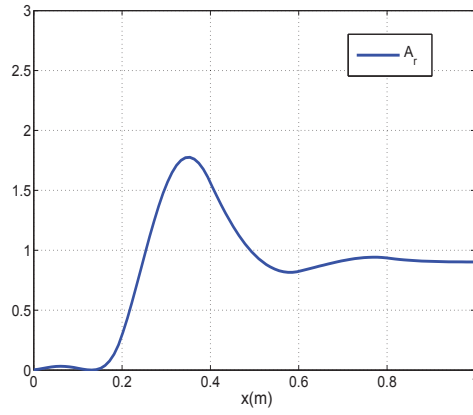
FIGURE 3.7.4 – Commande T_{j3} avec 5 intervalles

La figure 3.7.5 montre l'évolution temporelle et spatiale de la fonction de disponibilité réduite locale. La figure 3.7.6 présente le profil spatial final (à un temps de simulation $t=200s$) de la disponibilité réduite locale. Nous remarquons que la disponibilité réduite locale ne converge pas vers 0 ; ceci est l'image d'une erreur statique.

3.7.2 Commande uniforme

Nous considérons dans cette section que T_j est uniforme le long du réacteur ($T_j(x, t) = T_j(t)$).

Proposition 9. *Le système (3.3.4) en boucle fermée avec la loi de commande suivante pour*

FIGURE 3.7.5 – La disponibilité réduite locale avec la commande T_{j_3} appliquée sur 5 intervallesFIGURE 3.7.6 – Profil spatial final de la disponibilité réduite locale avec la commande T_{j_3} appliquée sur 5 intervalles

T_j (supposée uniforme) :

$$T_{j_5}(t) = \frac{\int_0^L (C\tilde{w}_h T(x,t) + \tilde{w}_r^T \frac{\partial F}{\partial x} - \tilde{w}_r^T R + \tilde{z}K(z)\tilde{z})dx}{C \int_0^L \tilde{w}_h dx} \quad (3.7.2)$$

est globalement asymptotiquement stable en z_d . Avec $K(z)$ une matrice définie positive de z .

Démonstration. à partir de l'expression de la commande (3.7.2) nous pouvons écrire :

$$\int_0^L \tilde{w}_h q(t) = \tilde{w}_r^T \frac{\partial F}{\partial x} - \tilde{w}_r^T R + \tilde{z}K(z)\tilde{z}dx \quad (3.7.3)$$

où $q := C(T_{j_5} - T)$. En remplaçant le terme $\int_0^L \tilde{w}_h q(t)dx$ dans la dynamique de la fonction de disponibilité réduite (3.5.1), nous obtenons :

$$\frac{dA_r(z)}{dt} = - \int_0^L \tilde{z}^T K(z) \tilde{z} dx \quad (3.7.4)$$

En utilisant les mêmes arguments que dans la démonstration de la proposition 7 nous concluons sur la stabilité asymptotique du système en z_d . \square

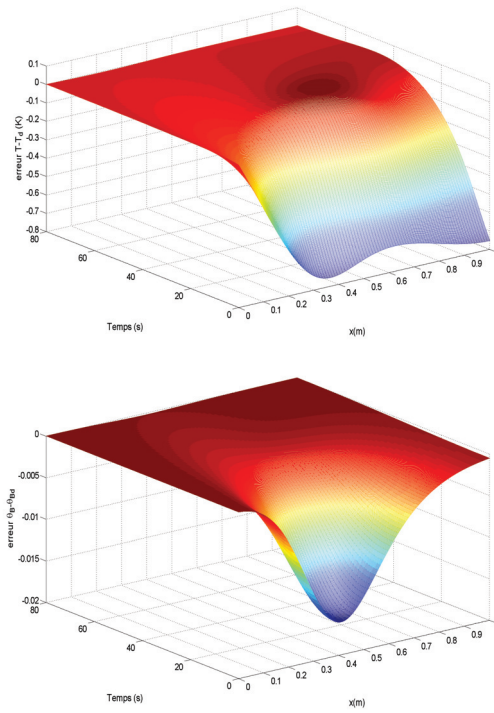


FIGURE 3.7.7 – Erreurs de stabilisation pour T et θ_B en boucle fermée avec la commande T_{j_5}

Nous constatons dans les résultats de la figure 3.7.7 un temps de réponse, approximativement, de 100s, et qu'en régime stationnaire le système converge exactement vers le profil d'équilibre. La figure 3.7.8 montre l'évolution temporelle et spatiale de la température de la double enveloppe le long du réacteur.

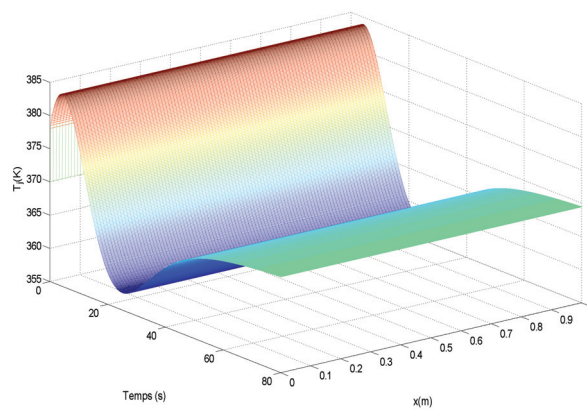
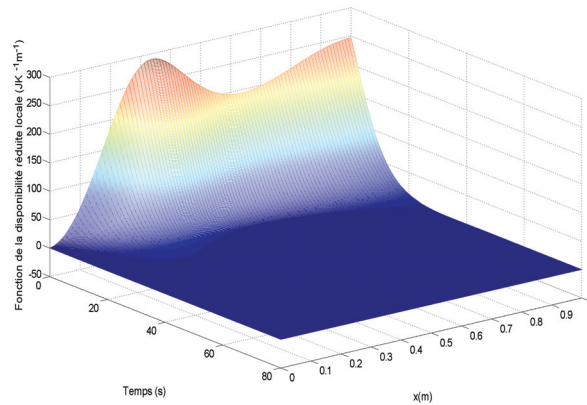


FIGURE 3.7.8 – La commande uniforme T_{j_5}

La figure 3.7.9 montre l'évolution temporelle et spatiale de la fonction de disponibilité réduite locale. Nous remarquons qu'elle converge asymptotiquement et globalement vers zéro le long du réacteur tubulaire.

FIGURE 3.7.9 – La disponibilité réduite locale pour la commande uniforme T_{j5}

3.8 Conclusion et perspectives

Dans ce chapitre, nous avons synthétisé plusieurs lois de commande distribuées données sous la forme de retour d'état non-linéaire pour la stabilisation du réacteur tubulaire chimique incluant les phénomènes de réaction, convection et diffusion. Pour cette synthèse, nous avons utilisé la fonction de disponibilité et disponibilité réduite comme fonctions de Lyapunov définies à partir de l'entropie du système. Les commandes proposées permettent de rendre la dérivée de la fonction de disponibilité (ou celle réduite) définies négatives le long des trajectoires du système en boucle fermée. Cela a été possible en forçant le terme de dérive à être un terme quadratique défini négatif en \tilde{z} ou bien à être un terme homogène à la fonction de disponibilité. La stabilité du système en boucle fermée est donnée en utilisant en plus l'hypothèse d'unicité de la composition des espèces chimiques à l'intérieur du réacteur pour une température fixe.

Nous avons proposé des lois de réglage des gains des différentes commandes afin d'assurer des amplitudes et des variations admissibles pour la température de la double enveloppe. Néanmoins, les commandes basées sur la disponibilité réduite présentent le double avantage d'accélérer la stabilisation du système au profil d'équilibre mais aussi d'assurer les plus faibles amplitudes et variations de l'entrée de commande.

Nous avons proposé aussi dans ce chapitre, deux approches de commande dites pratiques, dans le sens où elles intègrent un modèle de double enveloppe réaliste en terme d'actionnement. La première est calculée comme une moyenne des commandes distribuées sur un certain nombre de segments de la double enveloppe. Elle constitue donc une approximation de la commande distribuée qui induit une erreur statique dans la stabilisation. La deuxième, est une nouvelle commande synthétisée en utilisant la fonction de disponibilité avec l'hypothèse d'une température de la double enveloppe considérée uniforme (en espace). Cette commande permet de stabiliser asymptotiquement et globalement le réacteur tubulaire au profil d'équilibre désiré.

Dans ce chapitre nous n'avons pas abordé le problème du contrôle à la frontière. Cet aspect

sera abordé dans le chapitre 5 par l'analyse de l'existence des solutions des systèmes contrôlés à la frontière.

Comme perspectives à ce chapitre il serait intéressant d'optimiser les gains des différentes commandes dans l'objectif d'améliorer les performances de stabilisation, notamment en terme de temps de réponse et d'amplitude de la commande. Nous envisageons aussi de généraliser la répartition de la fonction de disponibilité en deux parties : la partie matérielle A_M et la partie thermique A_r afin de définir une nouvelle fonction de Lyapunov qui tiendrait compte des avantages de A_r pour laquelle la convexité non stricte serait corrigée par une pondération particulière de A_M .

Chapitre 4

Représentation hamiltonienne à port du réacteur tubulaire

4.1 Introduction et mes contributions

Dans le chapitre précédent nous avons proposé une commande stabilisante basée sur une fonction de Lyapunov issue de la thermodynamique des systèmes irréversibles. Nous souhaiterions pouvoir utiliser de manière plus systématique les propriétés structurelles de la thermodynamique des systèmes irréversibles ; pour cela nous proposons ici une représentation hamiltonienne à port d'un procédé de réaction diffusion sur laquelle nous pourrions nous appuyer dans le futur tant pour des méthodes de discrétisation structurée, de réduction spatiale ou de synthèse de commande basée sur la passivité [32].

La modélisation hamiltonienne des systèmes physiques fait apparaître les propriétés structurelles et géométriques qui sont au cœur du comportement énergétique et dynamique des systèmes. Ces propriétés sont mises en évidence par une structure géométrique dite de Dirac [26, 31] qui représente l'interconnexion entre tous les éléments énergétiques du système et qui traduit le principe de conservation de la puissance. La formulation hamiltonienne à port des systèmes en dimension finie a été largement étudiée pour les systèmes mécaniques [71, 32], les systèmes électriques [38, 32]. Pour les systèmes thermodynamiques, une telle représentation n'existe pas [45, 67, 68]. Il est cependant possible de mettre en avant une structure d'interconnexion reliant les différents flux énergétiques et dans ce cas très particulier la création irréversible d'entropie, flux très important dans la mesure où le domaine thermique est prépondérant. Des études concernant la représentation du RPAC ont été publiées :

- une étude concernant une représentation pseudo hamiltonienne du modèle du RPAC [45] ; les matrices de structure de la représentation dépendent de la variable de co-énergie, la température. Cette représentation est basée sur la propriété que toute matrice M peut se décomposer en une partie symétrique et une partie antisymétrique : $M = \frac{M-M^T}{2} + \frac{M+M^T}{2}$ qui correspondront au matrice d'interconnexion et de dissipation.

- une seconde étude concernant une représentation quasi-hamiltonienne appelée Système Hamiltonien à Port Irréversible (IPHS) [67, 68]. Dans ce cas les matrices de structure sont indépendantes des variables de co-énergie mais elles sont prémultipliées par une fonction de modulation dépendant de ces variables de co énergie.

La représentation hamiltonienne à port a été étendue au cas des systèmes à paramètres distribués en généralisant la notion de structure de Dirac. Cette nouvelle structure est appelée structure de Stokes-Dirac [82]. Cette structure traduit le couplage entre tous les phénomènes énergétiques sur le domaine spatial sur lequel est défini le système ainsi que la conservation d'énergie. La formulation hamiltonienne à port en dimension infinie est largement utilisée dans le domaine mécanique et électrique ([62]). Son utilisation dans le domaine thermodynamique est plus restreinte de par la classe de nonlinéarités des lois constitutives des réactions chimiques en particulier. Elle a été utilisée pour un procédé d'adsorption isotherme [16, 15] ainsi que pour la dispersion de la chaleur [32].

A titre d'introduction nous considérons dans un premier temps l'exemple de la ligne de transmission puis nous étendrons la représentation aux systèmes thermodynamiques.

4.1.1 Mes contributions

Dans ce chapitre, nous proposons comme contribution originale une représentation hamiltonienne à port (l'obtention d'une structure de Stokes -Dirac) d'un système réaction-diffusion en représentation énergétique et entropique. Nous proposons également une représentation pseudo hamiltonienne (les matrices de structure dépendent des variables de co-état) de ce même système réaction-diffusion en représentation énergétique et entropique.

La principale difficulté pour l'obtention de cette représentation, autre que celle due à la non linéarité de la cinétique de la réaction chimique, concerne la représentation de l'irréversibilité des phénomènes et la conservation de l'énergie. Pour ce faire nous avons ouvert les ports de dissipation comme pour un système avec dissipation. Mais comme le domaine thermique est représenté on doit réinjecter cette énergie dans ce domaine afin de satisfaire le premier principe. L'obtention des représentations hamiltoniennes en vision énergétique est obtenue dans tous les cas en étendant les variables d'effort et de flux thermodynamiques en y rajoutant les couples de variables dus aux phénomènes physiques ainsi que les couples de variables de port associés à l'irréversibilité de ces phénomènes, à savoir la température et le taux de production irréversible d'entropie dans le domaine thermique. En vision entropique un même type d'extensions est proposé.

4.1.2 Organisation du chapitre

En guise d'illustration de la méthode, dans la première section nous donnons les représentations hamiltoniennes de la ligne de transmission dans le cas de la dimension 1 , système à deux domaines d'énergie :

- dans le cas non dissipatif [32]
- dans le cas dissipatif [32]
- dans le cas dissipatif avec la représentation du domaine thermique

Cette section permet de comprendre toute la problématique des représentations proposées dans le reste du chapitre et aussi de montrer comment l'irréversibilité se représente dans le cas des systèmes mécaniques ou électriques.

La seconde section concerne la représentation hamiltonienne à port en vision énergétique du système réaction diffusion. La troisième section concerne une représentation hamiltonienne à port en vision entropique du système réaction diffusion.

4.2 Représentation en dimension infinie des systèmes hamiltoniens à port

Nous présentons sur la base de l'exemple de la ligne de transmission la représentation en dimension infinie des systèmes hamiltoniens à port.

4.2.1 La ligne de transmission sans perte

La ligne de transmission est définie sur l'intervalle $\mathcal{X} = [a, b]$. Nous choisissons comme variables d'état la densité linéique de charge $q(x, t)$ et la densité de flux magnétique $\varphi(x, t)$ et comme hamiltonien l'énergie électro-magnétique totale

$$\mathbb{H}(q, \varphi) = \int_a^b \mathcal{H}(q, \varphi) dx \quad (4.2.1)$$

où $\mathcal{H}(q, \varphi)$ représente la densité linéique d'énergie :

$$\mathcal{H}(q, \varphi) = \frac{1}{2} \left[\frac{q(x, t)^2}{C(x)} + \frac{\varphi(x, t)^2}{L(x)} \right]$$

Le bilan sur les deux variables d'état aboutit à :

$$\begin{cases} \partial_t q(x, t) &= -\partial_x i_L \\ \partial_t \varphi(x, t) &= -\partial_x v_C \end{cases} \quad (4.2.2)$$

où $C(x)$ et $L(x)$ représentent les capacités et inductances distribuées et avec le courant $i_L(x, t) = \frac{\delta \mathbb{H}(q, \varphi)}{\delta \varphi} = \frac{\partial \mathcal{H}(q, \varphi)}{\partial \varphi} = \frac{\varphi(x, t)}{L(x)}$ et le voltage $v_C(x, t) = \frac{\delta \mathbb{H}(q, \varphi)}{\delta q} = \frac{\partial \mathcal{H}(q, \varphi)}{\partial q} = \frac{q(x, t)}{C(x)}$. $\frac{\delta \mathbb{H}(q, \varphi)}{\delta \varphi}$ représente la dérivée variationnelle de \mathbb{H} par rapport à φ qui dans notre cas est égale à $\frac{\partial \mathcal{H}(q, \varphi)}{\partial \varphi}$.

Notons $z = \begin{bmatrix} q \\ \varphi \end{bmatrix}$. Avec ces notations le système (4.2.2) peut s'écrire :

$$\partial_t z = \begin{pmatrix} 0 & -\partial_x \\ -\partial_x & 0 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathcal{H}(z)}{\partial q} \\ \frac{\partial \mathcal{H}(z)}{\partial \varphi} \end{bmatrix} = \mathcal{J} \frac{\delta \mathbb{H}(z)}{\delta z} \quad (4.2.3)$$

Nous considérons le vecteur de flux $f_z^T = (f_q \ f_\varphi) = (\partial_t q \ \partial_t \varphi)$ donné par la dérivée temporelle des variables (q, φ) ainsi que le vecteur d'effort $e_z^T = (e_q \ e_\varphi) = (\frac{\partial \mathcal{H}(z)}{\partial q} \ \frac{\partial \mathcal{H}(z)}{\partial \varphi})$ donné par la dérivée variationnelle de \mathbb{H} par rapport aux variables d'état (q, φ) . Nous complétons le système (4.2.3) avec les variables à la frontière suivantes :

$$e_\partial = \begin{pmatrix} e_\partial^a(t) \\ e_\partial^b(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_q|_{z=a} \\ e_q|_{z=b} \end{pmatrix}, \quad f_\partial = \begin{pmatrix} f_\partial^a(t) \\ f_\partial^b(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_\varphi|_{z=a} \\ e_\varphi|_{z=b} \end{pmatrix} \quad (4.2.4)$$

Nous définissons l'espace des variables de flux étendues à la frontière comme suit :

$$\mathcal{F} = \left\{ f = \begin{pmatrix} f_z \\ f_\partial \end{pmatrix} \in C^\infty(\mathcal{X})^2 \times \mathbb{R}^{\{a,b\}} \right\} \quad (4.2.5)$$

et l'espace des variables d'effort :

$$\mathcal{E} = \left\{ e = \begin{pmatrix} e_z \\ e_\partial \end{pmatrix} \in C^\infty(\mathcal{X})^2 \times \mathbb{R}^{\{a,b\}} \right\} \quad (4.2.6)$$

que nous munissons du produit bilinéaire suivant qui correspond au bilan intégral de puissance électro-magnétique :

$$\begin{aligned} \langle . | . \rangle &: \mathcal{E} \times \mathcal{F} \rightarrow \mathbb{R} \\ (e, f) &\rightarrow \langle e | f \rangle = \int_{\mathcal{X}} (e_q f_q + e_\varphi f_\varphi) dx + e_\partial(b) f_\partial(b) - e_\partial(a) f_\partial(a) \end{aligned} \quad (4.2.7)$$

Nous pouvons définir ce qu'est une structure de Stokes-Dirac

Definition 1. Une structure de Stokes-Dirac \mathcal{D} est un sous espace de $\mathcal{P} = \mathcal{F} \times \mathcal{E}$ maximale-ment isotropique par rapport au produit symétrisé

$$<< (e_1, f_1), (e_2, f_2) >> := \langle e_2 | f_1 \rangle + \langle e_1 | f_2 \rangle \quad \forall (e_i, f_i) \in \mathcal{P} \quad (4.2.8)$$

$$\text{soit : } \mathcal{D} = \mathcal{D}^\perp \text{ avec } \mathcal{D}^\perp = \left\{ p \in \mathcal{P} \mid << p, p_1 >> = 0, \forall p_1 \in \mathcal{D} \right\}$$

Dans le cas considéré ci dessus, nous avons :

Proposition 10. [32] Le sous espace linéaire $\mathcal{D} \subset \mathcal{F} \times \mathcal{E}$ défini par :

$$\mathcal{D} = \left\{ \left(\begin{pmatrix} f_q \\ f_\varphi \\ f_\partial \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} e_q \\ e_\varphi \\ e_\partial \end{pmatrix} \right) \in \mathcal{P} \mid \begin{pmatrix} f_q \\ f_\varphi \end{pmatrix} = \mathcal{J} \begin{pmatrix} e_q \\ e_\varphi \end{pmatrix} \text{ et } \begin{bmatrix} f_\partial \end{bmatrix}_{|a,b} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} e_q \\ e_\varphi \end{bmatrix}_{|a,b} \right\} \quad (4.2.9)$$

est une structure de Stokes-Dirac par rapport au produit symétrisé (4.2.8) défini à partir du produit bilinéaire (4.2.7) avec \mathcal{J} défini en (4.2.3).

Nous laissons le lecteur se référer à [32] pour la démonstration.

Le système (4.2.2) défini à partir de l'hamiltonien (4.2.1) avec les conditions aux frontières (4.2.4) et la structure de Dirac (4.2.9) est un système hamiltonien à port de dimension infinie.

4.2.2 La ligne de transmission avec perte

Nous considérons ici la dissipation par effet joule d'un élément résistif distribué présent dans la ligne de transmission.

Le système (4.2.2) devient

$$\begin{cases} \partial_t q(x, t) &= -\partial_x i_L \\ \partial_t \varphi(x, t) &= -\partial_x v_C - Ri_L \end{cases} \quad (4.2.10)$$

où R est une résistance distribuée. En considérant l'extension suivante des variables de flux et d'effort $f_R = i_L$ et $e_R = Ri_L$ nous obtenons avec

l'espace des variables de flux comme suit :

$$\mathcal{F} = \left\{ f^T = \begin{pmatrix} f_q & f_\varphi & f_\partial & f_R \end{pmatrix} \in C^\infty(\mathcal{X})^2 \times \mathbb{R}^{\{a,b\}} \times C^\infty(\mathcal{X}) \right\} \quad (4.2.11)$$

et l'espace des variables d'effort :

$$\mathcal{E} = \left\{ e^T = \begin{pmatrix} e_q & e_\varphi & e_\partial & e_R \end{pmatrix} \in C^\infty(\mathcal{X})^2 \times \mathbb{R}^{\{a,b\}} \times C^\infty(\mathcal{X}) \right\} \quad (4.2.12)$$

Proposition 11. [32] *Le sous espace linéaire $\mathcal{D} \subset \mathcal{F} \times \mathcal{E}$ défini par :*

$$\begin{aligned} \mathcal{D} = \left\{ \left(\begin{pmatrix} f_q \\ f_\varphi \\ f_\partial \\ f_R \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} e_q \\ e_\varphi \\ e_\partial \\ e_R \end{pmatrix} \right) \in \mathcal{P} \mid \begin{pmatrix} f_q \\ f_\varphi \\ f_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\partial_x & 0 \\ -\partial_x & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_q \\ e_\varphi \\ e_R \end{pmatrix} \right. \\ \left. \text{et } \begin{bmatrix} f_\partial \\ e_\partial \end{bmatrix} \Big|_{a,b} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} e_q \\ e_\varphi \\ e_R \end{bmatrix} \Big|_{a,b} \right\} \end{aligned} \quad (4.2.13)$$

est une structure de Stokes-Dirac par rapport au produit symétrisé (4.2.8) défini à partir du produit bilinéaire suivant qui correspond au bilan intégral de puissance :

$$\begin{aligned} \langle \cdot | \cdot \rangle &: \mathcal{E} \times \mathcal{F} \rightarrow \mathbb{R} \\ (e, f) &\rightarrow \langle e | f \rangle = \int_{\mathcal{X}} \left(e_q f_q + e_\varphi f_\varphi + f_R e_R \right) dx \\ &\quad + e_\partial(b) f_\partial(b) - e_\partial(a) f_\partial(a) \end{aligned} \quad (4.2.14)$$

Nous laissons le lecteur se reporter à [84] pour la démonstration.

Remarque 4.1. *Le système (4.2.10) peut aussi s'écrire*

$$\frac{\partial z}{\partial t} = (\mathcal{J} - \mathcal{G}D\mathcal{G}^*) \frac{\delta H}{\delta z} \quad (4.2.15)$$

où, $D=R$, $\mathcal{G} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, son adjoint $\mathcal{G}^* = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}$

et la matrice $\begin{pmatrix} 0 & -\partial_x & 0 \\ -\partial_x & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ est égale à $\begin{pmatrix} \mathcal{J} & \mathcal{G} \\ -\mathcal{G}^* & 0 \end{pmatrix}$

4.2.3 La ligne de transmission avec perte avec représentation du domaine thermique

Nous prenons en compte la dissipation par effet joule qui est un phénomène irréversible et nous représentons son effet dans le domaine thermique. Nous ne considérons pas de phénomène de conduction et le système est supposé isolé.

Nous considérons comme hamiltonien l'énergie totale :

$$\mathcal{H}(q, \varphi, s) = \frac{1}{2} \left[\frac{q(x, t)^2}{C(x)} + \frac{\varphi(x, t)^2}{L(x)} \right] + T(x, t)s(x, t)$$

où la température $T(x)$ de la résistance est la dérivée variationnelle de \mathbb{H} par rapport à la densité linéique d'entropie s . Le système (4.2.10) devient

$$\begin{cases} \partial_t q(x, t) &= -\partial_x i_L \\ \partial_t \varphi(x, t) &= -\partial_x v_C - Ri_L \\ \partial_t s(x, t) &= \sigma \end{cases} \quad (4.2.16)$$

où s est la densité linéique d'entropie et $\sigma = \frac{e_R f_R}{T}$ est la production irréversible d'entropie due à l'échauffement de la résistance dérivée de la conservation de l'énergie totale.

En considérant les extensions suivantes des variables de flux et d'effort $f_s = \partial_t s, e_s = T = \frac{\delta \mathbb{H}(q, \varphi, s)}{\delta s}$, $f_\sigma = -\sigma$ et $f_\sigma = T$ nous obtenons les espaces de flux et d'effort étendus \mathcal{F} et \mathcal{E} :

$$\mathcal{F} = \left\{ f^T = \begin{pmatrix} f_q & f_\varphi & f_s & f_\partial & f_R & f_\sigma \end{pmatrix} \in C^\infty(\mathcal{X})^3 \times \mathbb{R}^{\{a, b\}} \times C^\infty(\mathcal{X})^2 \right\} \quad (4.2.17)$$

et

$$\mathcal{E} = \left\{ e^T = \begin{pmatrix} e_q & e_\varphi & e_s & e_\partial & e_R & e_\sigma \end{pmatrix} \in C^\infty(\mathcal{X})^3 \times \mathbb{R}^{\{a, b\}} \times C^\infty(\mathcal{X})^2 \right\} \quad (4.2.18)$$

Proposition 12. *Le sous espace linéaire $\mathcal{D} \subset \mathcal{F} \times \mathcal{E}$ défini par :*

$$\mathcal{D} = \left\{ \left(\begin{pmatrix} f_q \\ f_\varphi \\ f_s \\ f_\partial \\ f_R \\ f_\sigma \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} e_q \\ e_\varphi \\ e_s \\ e_\partial \\ e_R \\ e_\sigma \end{pmatrix} \right) \in \mathcal{P} \mid \begin{pmatrix} f_q \\ f_\varphi \\ f_s \\ f_R \\ f_\sigma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\partial_x & 0 & 0 & 0 \\ -\partial_x & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_q \\ e_\varphi \\ e_s \\ e_R \\ e_\sigma \end{pmatrix} \right. \\ \left. \text{et } \begin{bmatrix} f_\partial \\ e_\partial \end{bmatrix} \Big|_{a, b} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} e_q \\ e_\varphi \\ e_s \\ e_R \\ e_\sigma \end{bmatrix} \Big|_{a, b} \right\} \quad (4.2.19)$$

est une structure de Stokes-Dirac par rapport au produit symétrisé (4.2.8) défini à partir du produit bilinéaire suivant qui correspond au bilan intégral de puissance :

$$\langle e|f \rangle = \int_{\mathcal{X}} (e_q f_q + e_\varphi f_\varphi + f_s e_s + f_R e_R + f_\sigma e_\sigma) dx + e_\partial(b) f_\partial(b) - e_\partial(a) f_\partial(a) \quad (4.2.20)$$

Démonstration. Nous allons d'abord montrer que $\mathcal{D} \subset \mathcal{D}^\perp$. Pour cela nous considérons deux paires de variables de flux et d'effort appartenant à \mathcal{D} :

$$f = \begin{pmatrix} f_q \\ f_\varphi \\ f_s \\ f_\partial \\ f_R \\ f_\sigma \end{pmatrix}, \quad e = \begin{pmatrix} e_q \\ e_\varphi \\ e_s \\ e_\partial \\ e_R \\ e_\sigma \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad f' = \begin{pmatrix} f'_q \\ f'_\varphi \\ f'_s \\ f'_\partial \\ f'_R \\ f'_\sigma \end{pmatrix}, \quad e' = \begin{pmatrix} e'_q \\ e'_\varphi \\ e'_s \\ e'_\partial \\ e'_R \\ e'_\sigma \end{pmatrix} \quad \text{dont nous faisons le}$$

produit symétrisé :

$$\begin{aligned} \langle\langle (e, f), (e', f') \rangle\rangle &= \langle e|f' \rangle + \langle e'|f \rangle \\ &= \int_{\mathcal{X}} (e_q f'_q + e_\varphi f'_\varphi + f'_s e_s + f'_R e_R + f'_\sigma e_\sigma) dx + e_\partial(b) f'_\partial(b) - e_\partial(a) f'_\partial(a) \\ &\quad + \int_{\mathcal{X}} (e'_q f_q + e'_\varphi f_\varphi + f_s e'_s + f_R e'_R + f_\sigma e'_\sigma) dx + e'_\partial(b) f_\partial(b) - e'_\partial(a) f_\partial(a) \\ &= \int_{\mathcal{X}} (-e_q \partial_x e'_\varphi + e_\varphi (-\partial_x e'_q - e'_R) + f'_s e_s + f'_R e_R + f'_\sigma e_\sigma) dx \\ &\quad + e_q(b) e'_\varphi(b) - e_q(a) e'_\varphi(a) \\ &\quad + \int_{\mathcal{X}} (-e'_q \partial_x e_\varphi + e'_\varphi (-\partial_x e_q - e_R) + f_s e'_s + f_R e'_R + f_\sigma e'_\sigma) dx \\ &\quad + e'_q(b) e_\varphi(b) - e'_q(a) e_\varphi(a) \end{aligned} \quad (4.2.21)$$

En réarrangeant les terme nous obtenons :

$$\begin{aligned} \langle\langle (e, f), (e', f') \rangle\rangle &= \overbrace{\int_{\mathcal{X}} (-e_q \partial_x e'_\varphi - e'_\varphi \partial_x e_q) dx}^{-[e_q e'_\varphi]_a^b} + \overbrace{\int_{\mathcal{X}} (-e_\varphi \partial_x e'_q - e'_q \partial_x e_\varphi) dx}^{-[e'_q e_\varphi]_a^b} \\ &\quad + e_q(b) e'_\varphi(b) - e_q(a) e'_\varphi(a) + e'_q(b) e_\varphi(b) - e'_q(a) e_\varphi(a) \\ &\quad - \int_{\mathcal{X}} (e_\varphi e'_R + e'_\varphi e_R) dx \\ &\quad + \int_{\mathcal{X}} (f'_s e_s + f'_R e_R + f'_\sigma e_\sigma + f_s e'_s + f_R e'_R + f_\sigma e'_\sigma) dx \end{aligned} \quad (4.2.22)$$

qui peut encore s'écrire comme :

$$\langle\langle (e, f), (e', f') \rangle\rangle = \int_{\mathcal{X}} (-e_\varphi e'_R - e'_\varphi e_R + f'_s e_s + f'_R e_R + f'_\sigma e_\sigma + f_s e'_s + f_R e'_R + f_\sigma e'_\sigma) dx \quad (4.2.23)$$

En remplaçant les flux par leur expression en fonction des efforts nous obtenons :

$$\begin{aligned} \langle\langle (e, f), (e', f') \rangle\rangle &= \int_{\mathcal{X}} (-e_\varphi e'_R - e'_\varphi e_R - e'_\sigma e_s + e'_\varphi e_R + e'_s e_\sigma - e_\sigma e'_s + e_\varphi e'_R + e_s e'_\sigma) dx \\ &= 0 \end{aligned} \quad (4.2.24)$$

Nous avons donc bien $\mathcal{D} \subset \mathcal{D}^\perp$.

La deuxième partie de la preuve consiste à montrer que $\mathcal{D}^\perp \subset \mathcal{D}$. Pour cela nous considérons une paire de variables d'effort et de flux $(e', f') \in \mathcal{E} \times \mathcal{F}$ telle que pour tout élément $(e, f) \in \mathcal{D}$ le produit symétrisé est nul :

$$<< (e, f), (e', f') >> := 0 \quad (4.2.25)$$

De la définition de la structure (4.2.19) nous remarquons que le choix des variables e_q, e_φ, e_s, e_R et e_σ est libre. Donc pour l'élément de \mathcal{D} nous pouvons choisir arbitrairement ces éléments.

Prenons dans un premier temps des fonctions e_q, e_φ qui s'annulent sur le bord du domaine.

Tous d'abord nous calculons $< e' | f >$ en remplaçant f par les relations données dans (4.2.19) en considérant les conditions frontières nulles sur e_q, e_φ :

$$\begin{aligned} < e' | f > &= \int_{\mathcal{X}} \left(-e'_q \partial_x e_\varphi + e'_\varphi (-\partial_x e_q - e_R) - e'_s e_\sigma + e'_R e_\varphi + e'_\sigma e_s \right) dx + \overbrace{e'_\partial(b) e_\varphi(b) - e'_\partial(a) e_\varphi(a)}^{=0} \\ &= \int_{\mathcal{X}} \left(e_\varphi \partial_x e'_q + e_q \partial_x e'_\varphi - e'_\varphi e_R - e'_s e_\sigma + e'_R e_\varphi + e'_\sigma e_s \right) dx \end{aligned} \quad (4.2.26)$$

Par la relation qui doit être vérifiée $<< (e, f), (e', f') >> := < e' | f > + < e | f' > = 0$ Nous avons :

$$< e | f' > = - \int_{\mathcal{X}} \left(e_\varphi \partial_x e'_q + e_q \partial_x e'_\varphi - e'_\varphi e_R - e'_s e_\sigma + e'_R e_\varphi + e'_\sigma e_s \right) dx \quad (4.2.27)$$

mais nous avons aussi :

$$< e | f' > = \int_{\mathcal{X}} \left(e_q f'_q + e_\varphi f'_\varphi + f'_s e_s + f'_R e_R + f'_\sigma e_\sigma \right) dx + \overbrace{e_q(b) f'_\partial(b) - e_q(a) f'_\partial(a)}^{=0} \quad (4.2.28)$$

Les relations (4.2.27) et (4.2.28) doivent être égales et ceci quel que soit l'élément e :

$$\int_{\mathcal{X}} \left(e_\varphi \partial_x e'_q + e_q \partial_x e'_\varphi - e'_\varphi e_R - e'_s e_\sigma + e'_R e_\varphi + e'_\sigma e_s \right) dx + \int_{\mathcal{X}} \left(e_q f'_q + e_\varphi f'_\varphi + f'_s e_s + f'_R e_R + f'_\sigma e_\sigma \right) dx = 0 \quad (4.2.29)$$

Nous en déduisons que l'égalité ci dessous doit être vérifiée quel que soit l'élément e :

$$\int_{\mathcal{X}} \left(e_\varphi \left(\partial_x e'_q + f'_\varphi \right) + e_q \left(\partial_x e'_\varphi + f'_q \right) + e_R \left(-e'_\varphi + f'_R \right) + e_s \left(e'_\sigma + f'_s \right) + e_\sigma \left(f'_\sigma - e'_s \right) \right) dx = 0 \quad (4.2.30)$$

Nous en déduisons par identification que l'élément f' doit obligatoirement vérifier :

$$\begin{cases} f'_\varphi = -\partial_x e'_q - e'_R \\ f'_q = -\partial_x e'_\varphi \\ f'_R = e'_\varphi \\ f'_s = -e'_\sigma \\ f'_\sigma = e'_s \end{cases} \quad (4.2.31)$$

qui correspondent aux relations définies pour les éléments de \mathcal{D} ((4.2.19)).

Considérons maintenant le cas où les variables frontières ne sont pas nulles. Nous utilisons les relations de f' (4.2.31) dans l'équation (4.2.21) ainsi que celle de f :

$$\begin{aligned}
\langle\langle (e, f), (e', f') \rangle\rangle &= \int_{\mathcal{X}} (e_q (-\partial_x e'_\varphi) + e_\varphi (-\partial_x e'_q - e'_R) + (-e'_\sigma) e_s + (e'_\varphi) e_R + (e'_s) e_\sigma) dx \\
&\quad + e'_{\partial}(b) e_\varphi(b) - e'_{\partial}(a) e_\varphi(a) \\
&\quad + \int_{\mathcal{X}} (-e'_q \partial_x e_\varphi + e'_\varphi (-\partial_x e_q - e_R) - e_\sigma e'_s + e_\varphi e'_R + e_s e'_\sigma) dx \\
&\quad + e_q(b) f'_{\partial}(b) - e_q(a) f'_{\partial}(a) \\
&= \int_{\mathcal{X}} (e_q (-\partial_x e'_\varphi) + e_\varphi (-\partial_x e'_q)) dx + e'_{\partial}(b) e_\varphi(b) - e'_{\partial}(a) e_\varphi(a) \\
&\quad + \int_{\mathcal{X}} (-e'_q \partial_x e_\varphi + e'_\varphi (-\partial_x e_q)) dx + e_q(b) f'_{\partial}(b) - e_q(a) f'_{\partial}(a) \\
&= [-e_q e'_\varphi]_a^b + [-e_\varphi e'_q]_a^b(b) \\
&\quad + e'_{\partial}(b) e_\varphi(b) - e'_{\partial}(a) e_\varphi(a) + e_q(b) f'_{\partial}(b) - e_q(a) f'_{\partial}(a) \\
&:= 0
\end{aligned} \tag{4.2.32}$$

l'égalité doit rester vraie quelles que soient les conditions à la frontière e_{∂} , f_{∂} , nous obtenons ainsi :

$$\begin{cases} e'_{\partial}(a) &= e'_q(a) \\ e'_{\partial}(b) &= e'_q(b) \\ f'_{\partial}(a) &= e'_\varphi(a) \\ f'_{\partial}(b) &= e'_\varphi(b) \end{cases} \tag{4.2.33}$$

qui correspondent aux relations à la frontière de la structure (4.2.19). Ainsi nous avons montré que $\mathcal{D}^\perp \subset \mathcal{D}$.

Nous concluons que $\mathcal{D} = \mathcal{D}^\perp$ et donc que \mathcal{D} est une structure de Stokes-Dirac. \square

4.2.4 Conclusion

Nous avons montré comment on peut représenter sur la ligne de transmission un phénomène irréversible. Pour ce faire nous avons analysé le cas où nous ne prenons pas en compte le domaine thermique et donc il y a dissipation de l'énergie électro-magnétique et aussi le cas où nous prenons en compte le domaine thermique pour lequel il y a conservation de l'énergie totale. En plus de cela, nous avons mis en évidence une structure d'interconnexion sur l'espace étendu des variables de flux et effort qui traduit précisément la conservation d'énergie dans le cas d'un système irréversible. En annexe, nous fournissons dans les transparents de la représentation des schémas qui permettent de mieux comprendre la structure étendue adoptée dans les cas dissipatifs et aussi avec représentation du domaine thermique.

4.3 Représentation hamiltonienne à port en vision énergétique

Nous allons dans la suite de ce chapitre reprendre ce même type d'extension pour obtenir une représentation hamiltonienne à port d'un système 1D réaction-diffusion défini sur l'intervalle $\mathcal{X} = [0, L]$ présenté par (4.3.1) :

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial z}{\partial t} \\ e_R \\ e_\sigma \end{pmatrix} = \mathcal{J}_e \begin{pmatrix} \frac{\delta H}{\delta z} \\ f_R \\ f_\sigma \end{pmatrix} + \mathcal{B}_e u \quad \text{avec} \quad f_\sigma e_\sigma = f_R e_R \quad (4.3.1)$$

où $z(t, x)$ est le vecteur des variables d'état du système, $u(t, x) \in C^\infty(\mathcal{Z})$ est la variable de commande distribuée, \mathcal{J}_e est un opérateur différentiel antisymétrique donné par $\mathcal{J}_e = P_1 \frac{\partial}{\partial z} + P_0$ avec P_1 une matrice symétrique et P_0 une matrice antisymétrique et $H(x)$ est l'hamiltonien du système. \mathcal{B}_e est un opérateur linéaire. Les extensions nécessaires sont données par les couples effort flux (e_{xt}, f_{xt}) .

Dans cette section, nous rappelons le modèle thermodynamique associé à un système réaction-diffusion. Nous présentons ensuite une formulation hamiltonienne de ce modèle obtenue en ouvrant tous les ports de dissipation puis une formulation quasi hamiltonienne en laissant fermé le port de dissipation du à la réaction.

4.3.1 Formulation énergétique du modèle réaction-diffusion

Dans ce chapitre, nous considérons un système réaction-diffusion. Le modèle est présenté en annexe.

Le flux de diffusion F_{dis}^i d'espèce i (pour $i = A, B$) est modélisé en fonction de la force thermodynamique [79, 15, 29] $\partial_x \mu_i$:

$$F_{dis}^A = -D \partial_x (\mu_A - \mu_B) \quad (4.3.2)$$

et

$$F_{dis}^B = -D \partial_x (\mu_B - \mu_A) \quad (4.3.3)$$

où D est le coefficient de diffusion. Avec les lois constitutives ci-dessus nous avons la contrainte $F_{dis}^A + F_{dis}^B = 0$ satisfaite.

La réaction et la dispersion thermique ont les mêmes lois constitutives que celles présentées dans les chapitres précédents.

Le modèle est donné par :

$$\begin{aligned} \rho \partial_t \theta_A &= -\partial_x F_{dis}^A - M_A \nu_A r \\ \rho \partial_t \theta_B &= -\partial_x F_{dis}^B + M_B \nu_B r \\ \rho \partial_t s &= -\partial_x F^s + \frac{q}{T_j} + \sigma \end{aligned} \quad (4.3.4)$$

où M_i est la masse molaire d'espèce i , q est l'échange de chaleur avec la double enveloppe, T_j est la température distribuée de la double enveloppe. Le flux total d'entropie

$F^s = \sum_{i=A,B} F_{dis}^s + F_{cond}^s$ avec le flux d'entropie due à la diffusion $F_{dis}^s = \sum_{i=A,B} F_{dis}^i s_i$ et le flux d'entropie due à la diffusion thermique $F_{cond}^s = \frac{f_{cond}^h}{T}$. s_i est l'entropie massique partielle de l'espèce i .

La production irréversible d'entropie σ_s est donnée par :

$$\sigma = \overbrace{q\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_j}\right)}^{\sigma_{ext}} + \overbrace{\frac{r}{T}(\mu_A M_A \nu_A - \mu_B M_B \nu_B)}^{\sigma_r} - \overbrace{\frac{1}{T} F_{dis}^A \partial_x \mu_A}^{\sigma_A} - \overbrace{\frac{1}{T} F_{dis}^B \partial_x \mu_B}^{\sigma_B} - \overbrace{F^s \frac{\partial_x T}{T}}^{\sigma_s} \quad (4.3.5)$$

Tous les termes de σ sont positifs ([40],[24]).

4.3.2 Représentation hamiltonienne du modèle réaction-diffusion

Cette représentation est basée sur l'équation de Gibbs en vision énergétique (1.2.9) : $\rho du = T \rho ds + \sum \rho \mu_i d\theta_i$. Les équations d'état sont le bilan d'entropie et les bilans d'espèce et l'Hamiltonien est l'énergie interne.

Le choix des variables d'effort et de flux va découler des couples de variables apparaissant dans le bilan intégral d'énergie :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_0^L u dx &= \int_0^L \partial_t u dx \\ &= \int_0^L (T \rho \partial_t s + \sum \mu_i \rho \partial_t \theta_i) dx \end{aligned} \quad (4.3.6)$$

Les couples de variables (flux, effort) conjugués de puissance suivants apparaissent naturellement :

TABLE 4.1 – Couples flux-effort thermodynamiques en vision énergétique

Flux	Efforts
$F_A = \rho \partial_t \theta_A$	$e_A = \mu_A$
$F_B = \rho \partial_t \theta_B$	$e_B = \mu_B$
$F_s = \rho \partial_t s$	$e_s = T$

En développant les calculs pour faire apparaître les variables aux frontières nous obtenons :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_0^L u dx &= \int_0^L \left(T \left(-\partial_x F^s + \frac{q}{T_j} + \sigma \right) + \mu_A \left(-\partial_x F_{dis}^A - M_A \nu_A r \right) + \mu_B \left(-\partial_x F_{dis}^B + M_B \nu_B r \right) \right) dx \\ &= \int_0^L \left(F^s \partial_x T + F_{dis}^A \partial_x \mu_A + F_{dis}^B \partial_x \mu_B \right) dx + \left[-T F^s - \mu_A F_{dis}^A - \mu_B F_{dis}^B \right]_0^L \\ &\quad + \int_0^L \left(T \left(\frac{q}{T_j} + \sigma \right) - \overbrace{(\mu_A M_A \nu_A - \mu_B M_B \nu_B) r}^{=A} \right) dx \end{aligned} \quad (4.3.7)$$

Nous voyons apparaître les couples de variables récapitulés dans le tableau 4.2 :

TABLE 4.2 – Couples flux-effort supplémentaires en vision énergétique

Flux	Efforts	Flux a la frontière	Efforts à la frontière
$f_A = F_{dis}^A$	$E_A = -\partial_x \mu_A$	$f_{\partial}^A = f_A$	$e_{\partial}^A = e_A$
$f_B = F_{dis}^B$	$E_B = -\partial_x \mu_B$	$f_{\partial}^B = f_B$	$e_{\partial}^B = e_B$
$f_s = F^s$	$E_s = -\partial_x T$	$f_{\partial}^s = f_s$	$e_{\partial}^s = e_s$
$f_r = r$	$E_r = \mathcal{A}$		
$f_{\sigma_A} = -\sigma_A$	$e_{\sigma_A} = T$		
$f_{\sigma_B} = -\sigma_B$	$e_{\sigma_B} = T$		
$f_{\sigma_S} = -\sigma_s$	$e_{\sigma_S} = T$		
$f_{\sigma_r} = -\sigma_r$	$e_{\sigma_r} = T$		
$u = -\frac{q}{T}$	$y = T$		

Le bilan d'énergie peut se réécrire en utilisant (4.3.6) et (4.3.7) comme

$$\begin{aligned}
\int_0^L (T\rho\partial_t s + \sum \mu_i \rho\partial_t \theta_i) & - \int_0^L (F^s \partial_x T + F_{dis}^A \partial_x \mu_A + F_{dis}^B \partial_x \mu_B) dx \\
& - [-TF^s - \mu_A F_{dis}^A - \mu_B F_{dis}^B]_0^L \\
& - \int_0^L \left(T \left(\frac{q}{T_j} + \sigma \right) - \overbrace{(\mu_A M_A \nu_A - \mu_B M_B \nu_B)}^{=\mathcal{A}} r \right) dx = 0
\end{aligned} \tag{4.3.8}$$

En remplaçant par les variables de port, nous obtenons :

$$\begin{aligned}
\int_0^L (e_A F_A + e_B F_B + e_s F_s + E_A f_A + E_B f_B + E_s f + E_r f_r + e_{\sigma_A} f_{\sigma_A} + e_{\sigma_B} f_{\sigma_B} + e_{\sigma_S} f_{\sigma_S} + e_{\sigma_r} f_{\sigma_r} + uy) dx \\
+ [e_{\partial}^A f_{\partial}^A + e_{\partial}^B f_{\partial}^B + e_{\partial}^s f_{\partial}^s]_0^L = 0
\end{aligned} \tag{4.3.9}$$

Nous considérons les vecteurs $E \in \mathbf{E} = C^\infty(\mathcal{X})^{11}$ et $F \in \mathbf{F} = C^\infty(\mathcal{X})^{11}$:

$$\begin{aligned}
E &= \begin{pmatrix} e_A & e_B & e_s & f_A & f_B & f_s & f_r & f_{\sigma_A} & f_{\sigma_B} & f_{\sigma_S} & f_{\sigma_r} \end{pmatrix}^T \\
F &= \begin{pmatrix} F_A & F_B & F_s & E_A & E_B & E_s & E_r & e_{\sigma_A} & e_{\sigma_B} & e_{\sigma_S} & e_{\sigma_r} \end{pmatrix}^T
\end{aligned} \tag{4.3.10}$$

et avec les variables de port aux frontières suivantes :

$$e_{\partial} = \begin{pmatrix} e_{\partial}^A \\ e_{\partial}^B \\ e_{\partial}^s \end{pmatrix}, f_{\partial} = \begin{pmatrix} f_{\partial}^A \\ f_{\partial}^B \\ f_{\partial}^s \end{pmatrix} \tag{4.3.11}$$

nous avons :

$$\begin{pmatrix} e_{\partial} \\ f_{\partial} \end{pmatrix} (0, L) = \begin{pmatrix} I_3 & 0_3 & 0_{3 \times 5} \\ 0_3 & I_3 & 0_{3 \times 5} \end{pmatrix} E|_{0,L} \tag{4.3.12}$$

où $0_3, I_3 \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$, représentent respectivement la matrice zéro et la matrice identité et $0_{3 \times 5} \in \mathbb{R}^{3 \times 5}$ est une matrice de zéros.

Nous définissons les ensembles

$$\mathcal{F} = \left\{ \begin{bmatrix} F \\ u \\ f_{\partial} \end{bmatrix} \in \mathbf{F} \times C^{\infty}(\mathcal{X}) \times \mathbb{R}^{3 \times \{0, L\}} \right\}$$

et

$$\mathcal{E} = \left\{ \begin{bmatrix} E \\ y \\ e_{\partial} \end{bmatrix} \in \mathbf{E} \times C^{\infty}(\mathcal{X}) \times \mathbb{R}^{3 \times \{0, L\}} \right\}$$

ainsi que le produit bilinéaire :

$$\begin{aligned} \left\langle \begin{bmatrix} E \\ y \\ e_{\partial} \end{bmatrix} \mid \begin{bmatrix} F \\ u \\ f_{\partial} \end{bmatrix} \right\rangle &:= \langle E, F \rangle_{L^2} + \langle y, u \rangle_{L^2} \\ &+ \langle e_{\partial}^L, f_{\partial}^L \rangle_{R^3} - \langle e_{\partial}^0, f_{\partial}^0 \rangle_{R^3} \end{aligned} \quad (4.3.13)$$

avec

$$\begin{aligned} \langle E, F \rangle_{L^2} &= \int_0^L (e_A F_A + e_B F_B + e_s F_s + E_A f_A + E_B f_B + E_s f_s + E_r f_r \\ &\quad + e_{\sigma_A} f_{\sigma_A} + e_{\sigma_B} f_{\sigma_B} + e_{\sigma_S} f_{\sigma_S} + e_{\sigma_r} f_{\sigma_r}) dx \end{aligned}$$

$$\langle u, y \rangle_{L^2} = \int_0^L u y dx$$

$$\langle e_{\partial}^L, f_{\partial}^L \rangle_{R^3} = e_{\partial}^A f_{\partial}^A + e_{\partial}^B f_{\partial}^B + e_{\partial}^s f_{\partial}^s$$

Proposition 13. *Le sous-ensemble linéaire $\mathcal{D} \subset \mathcal{E} \times \mathcal{F}$ définie par : $\mathcal{D} = \left\{ \left(\begin{bmatrix} F \\ u \\ f_{\partial} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} E \\ y \\ e_{\partial} \end{bmatrix} \right) \in \right.$*

$$\left. \mathcal{E} \times \mathcal{F} \mid F = \mathcal{J}_e E + \begin{pmatrix} \mathcal{B} \\ 0_{3 \times 1} \\ 0_{5 \times 1} \end{pmatrix} u, y = -[\mathcal{B}^* \ 0_{1 \times 3} \ 0_{1 \times 5}] E, \begin{pmatrix} e_{\partial} \\ f_{\partial} \end{pmatrix} (0, L) = \begin{pmatrix} I_3 & 0_{3 \times 3} & 0_{3 \times 5} \\ 0_{3 \times 3} & I_3 & 0_{3 \times 5} \end{pmatrix} E|_{0, L} \right\}$$

est une structure de Stokes Dirac par rapport au produit symétrisé (4.2.8) construit à partir du produit bilinéaire (4.3.13) avec

$$- \text{ l'opérateur antisymétrique } \mathcal{J}_e = P_1 \partial_x + P_0, P_1 = \begin{pmatrix} 0_3 & -I_3 & 0_{3 \times 5} \\ -I_3 & 0_3 & 0_{3 \times 5} \\ 0_{5 \times 3} & 0_{5 \times 3} & 0_5 \end{pmatrix}, P_0 = \begin{pmatrix} 0_3 & 0_3 & P \\ 0_3 & 0_3 & 0_{3 \times 5} \\ -P^T & 0_{5 \times 3} & 0_5 \end{pmatrix}$$

$$\text{et } P = \begin{pmatrix} -\nu_A M_A & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \nu_B M_B & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & -1 & -1 \end{pmatrix},$$

– l'opérateur d'entrée $\mathcal{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$.

De plus, l'irréversibilité est définie par :

$$-E^T \begin{pmatrix} 0_3 & 0_{3 \times 4} & 0_{3 \times 4} \\ 0_{4 \times 3} & 0_4 & 0_4 \\ 0_{4 \times 3} & 0_4 & I_4 \end{pmatrix} F > 0 \Leftrightarrow -f_\sigma^T e \sigma > 0 \quad (4.3.14)$$

Remarque 4.2. La représentation proposée dans la proposition 13 est basée sur une extension des variables de port (flux et effort) correspondant aux variables duales naturelles pour les phénomènes de diffusion, réaction mais aussi de **la production irréversible d'entropie**.

Cette méthode revient à 'ouvrir' l'élément RS du bond graph (voir [32]). Cet élément est formé par la partie résistive R qui représente la dissipation due aux lois constitutives entre l'effort e_R et sa variable de flux f_R : $e_R = R(f_R)$. Comme l'énergie interne est conservative, cette dissipation apparaît comme un terme source S dans le domaine thermique. Les ports supplémentaires, dotés d'une paire des variables conjugués σ, T satisfont la relation de produit de puissance : $T\sigma_R = e_R f_R$ où σ_R est la production irréversible d'entropie associée à la loi constitutive défini par R .

Démonstration. Pour démontrer que \mathcal{D} est une structure de Stokes-Dirac, nous suivons la même démarche que pour la démonstration de la proposition 12.

Tout d'abord nous allons montrer $\mathcal{D} \subset \mathcal{D}^\perp$.

• $\mathcal{D} \subset \mathcal{D}^\perp$:

Nous considérons deux éléments de \mathcal{D} : $d_1 = \left(\begin{pmatrix} F_1 \\ u_1 \\ f_{\partial_1} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} E_1 \\ y_1 \\ e_{\partial_1} \end{pmatrix} \right)$ et $d_2 = \left(\begin{pmatrix} F_2 \\ u_2 \\ f_{\partial_2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} E_2 \\ y_2 \\ e_{\partial_2} \end{pmatrix} \right)$

et leur produit symétrisé :

$$\begin{aligned} \langle\langle d_1, d_2 \rangle\rangle &= \int_0^L (E_1^T F_2 + E_2^T F_1 + y_1 u_2 + y_2 u_1) dx \\ &\quad + [e_{\partial_1}^T f_{\partial_2} + e_{\partial_2}^T f_{\partial_1}]_L^0 \\ &= \int_0^L \mathcal{L} dx + \mathcal{M} \end{aligned} \quad (4.3.15)$$

où \mathcal{L} est la partie distribuée et \mathcal{M} est la partie frontière.

En utilisant les définitions des variables données par la relation (4.3.10), nous avons :

$$\begin{aligned}
\mathcal{L} = & e_{A_1}F_{A_2} + e_{B_1}F_{B_2} + e_{s_1}F_{s_2} + f_{A_1}E_{A_2} + f_{B_1}E_{B_2} + f_{s_1}E_{s_2} + f_{r_1}E_{r_2} \\
& + f_{\sigma_{A_1}}e_{\sigma_{A_2}} + f_{\sigma_{B_1}}e_{\sigma_{B_2}} + f_{\sigma_{s_1}}e_{\sigma_{s_2}} + f_{\sigma_{r_1}}e_{\sigma_{r_2}} \\
& + e_{A_2}F_{A_1} + e_{B_2}F_{B_1} + e_{s_2}F_{s_1} + f_{A_2}E_{A_1} + f_{B_2}E_{B_1} + f_{s_2}E_{s_1} + f_{r_2}E_{r_1} \\
& + f_{\sigma_{A_2}}e_{\sigma_{A_1}} + f_{\sigma_{B_2}}e_{\sigma_{B_1}} + f_{\sigma_{s_2}}e_{\sigma_{s_1}} + f_{\sigma_{r_2}}e_{\sigma_{r_1}} \\
& + y_1u_2 + y_2u_1
\end{aligned} \tag{4.3.16}$$

En remplaçant les expressions F_1 et F_2 par leur relation $F_i = JE_i + \begin{pmatrix} \mathcal{B} \\ 0_{3 \times 1} \\ 0_{5 \times 1} \end{pmatrix} u_i$ dans l'équation ci-dessus, nous avons en posant la notation $\sigma_{s_i} = -(f_{\sigma_{A_i}} + f_{\sigma_{B_i}} + f_{\sigma_{s_i}} + f_{\sigma_{r_i}})$:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L} = & e_{A_1}(-\partial_x f_{A_2} - M_A \nu_A f_{r_2}) + e_{B_1}(-\partial_x f_{B_2} + M_B \nu_B f_{r_2}) + e_{s_1}(-\partial_x f_{s_2} + \sigma_{s_2} - u_2) \\
& + e_{A_2}(-\partial_x f_{A_1} - M_A \nu_A f_{r_1}) + e_{B_2}(-\partial_x f_{B_1} + M_B \nu_B f_{r_1}) + e_{s_2}(-\partial_x f_{s_1} + \sigma_{s_1} - u_1) \\
& + f_{A_1}(-\partial_x e_{A_2}) + f_{B_1}(-\partial_x e_{B_2}) + f_{s_1}(-\partial_x e_{s_2}) + f_{r_1}(\nu_A M_A e_{A_2} - \nu_B M_B e_{B_2}) \\
& + f_{A_2}(-\partial_x e_{A_1}) + f_{B_2}(-\partial_x e_{B_1}) + f_{s_2}(-\partial_x e_{s_1}) + f_{r_2}(\nu_A M_A e_{A_1} - \nu_B M_B e_{B_1}) \\
& - \sigma_{s_1} e_{s_2} - \sigma_{s_2} e_{s_1} + y_1 u_2 + y_2 u_1
\end{aligned}$$

Par la relation $y_i = -[\mathcal{B}^* \ 0 \ 0]E_i$ nous avons $y_i = e_{s_i}$, ainsi les termes en u et y s'annulent. Les termes en σ_{s_1} s'annulent aussi. Par ailleurs en regroupant les termes en ∂_x on a :

$$\begin{aligned}
\mathcal{L} = & -\partial_x(e_{A_1}f_{A_2}) - \partial_x(e_{B_1}f_{B_2}) - \partial_x(e_{s_1}f_{s_2}) - \partial_x(e_{A_2}f_{A_1}) - \partial_x(e_{B_2}f_{B_1}) - \partial_x(e_{s_2}f_{s_1}) \\
& + e_{A_1}(-M_A \nu_A f_{r_2}) + e_{B_1}(+M_B \nu_B f_{r_1}) + e_{A_2}(-M_A \nu_A f_{r_1}) + e_{B_2}(M_B \nu_B f_{r_2}) \\
& + f_{r_1}(\nu_A M_A e_{A_2} - \nu_B M_B e_{B_2}) + f_{r_2}(\nu_A M_A e_{A_1} - \nu_B M_B e_{B_1})
\end{aligned}$$

L'expression $e_{A_1}(-M_A \nu_A f_{r_2}) + e_{B_1}(+M_B \nu_B f_{r_1}) + e_{A_2}(-M_A \nu_A f_{r_1}) + e_{B_2}(M_B \nu_B f_{r_2}) + f_{r_1}(\nu_A M_A e_{A_2} - \nu_B M_B e_{B_2}) + f_{r_2}(\nu_A M_A e_{A_1} - \nu_B M_B e_{B_1})$ est nulle. Nous concluons que :

$$\mathcal{L} = -\partial_x(e_{A_1}f_{A_2}) - \partial_x(e_{B_1}f_{B_2}) - \partial_x(e_{s_1}f_{s_2}) - \partial_x(e_{A_2}f_{A_1}) - \partial_x(e_{B_2}f_{B_1}) - \partial_x(e_{s_2}f_{s_1})$$

et que

$$\int_0^L \mathcal{L} dx = -[e_{\partial_1}^T f_{\partial_2} + e_{\partial_2}^T f_{\partial_1}]$$

Nous avons :

$$\mathcal{M} = [e_{\partial_1}^T f_{\partial_2} + e_{\partial_2}^T f_{\partial_1}]_L^0$$

Ainsi nous obtenons :

$$\int_0^L \mathcal{L} dx + \mathcal{M} dx = 0 \quad (4.3.17)$$

Nous avons donc $\langle\langle d_1, d_2 \rangle\rangle = 0$, qui montre que $\mathcal{D} \subset \mathcal{D}^\perp$.

• $\mathcal{D}^\perp \subset \mathcal{D}$: Pour montrer ce point, nous supposons $d_1 \in \mathcal{D}^\perp$, ce qui implique que pour tous les éléments $d_2 \in \mathcal{D}$ on a $\langle\langle d_1, d_2 \rangle\rangle = 0$

Par la définition de la structure donnée dans la proposition 13 le choix des variables de E_2 est libre. Dans un premier temps nous prenons des fonctions f_A, f_B, f_s et e_A, e_B, e_s qui s'annulent au bord du domaine. Par ailleurs on suppose que le réacteur est en régime autonome de sorte que $u=0$

Le produit symétrisé se simplifie et il vient :

$$\int_0^L (E_1^T F_2 + E_2^T F_1) dx = 0 \quad (4.3.18)$$

Nous remplaçons F_2 par les lois définies dans la structure de la proposition 13 dans l'équation (4.3.18) puisque $d_2 \in D$, nous avons donc :

$$\begin{aligned} E_1^T F_2 &= e_{A_1}(-\partial_x f_{A_2} - M_{A\nu_A} f_{r_2}) + e_{B_1}(-\partial_x f_{B_2} + M_{B\nu_B} f_{r_2}) + e_{s_1}(-\partial_x f_{s_2} - (f_{\sigma_{A_2}} + f_{\sigma_{B_2}} + f_{\sigma_{S_2}} + f_{\sigma_{r_2}}) \\ &\quad + f_{A_1}(-\partial_x e_{A_2}) + f_{B_1}(-\partial_x e_{B_2}) + f_{s_1}(-\partial_x e_{s_2}) \\ &\quad + f_{r_1}(\nu_A M_{Ae_{A_2}} - \nu_B M_{Be_{B_2}}) + f_{\sigma_{A_1}} e_{\sigma_{A_2}} + f_{\sigma_{B_1}} e_{\sigma_{B_2}} + f_{\sigma_{S_1}} e_{\sigma_{S_2}} + f_{\sigma_{r_1}} e_{\sigma_{r_2}} \\ &= f_{A_2} \partial_x e_{A_1} + f_{B_2} \partial_x e_{B_1} + f_{s_2} \partial_x e_{s_1} + e_{A_2} \partial_x f_{A_1} + e_{B_2} \partial_x f_{B_1} + e_{s_2} \partial_x f_{s_1} \\ &\quad - \partial_x (e_{A_1} f_{A_2}) - \partial_x (e_{B_1} f_{B_2}) - \partial_x (e_{s_1} f_{s_2}) - \partial_x (e_{A_2} f_{A_1}) - \partial_x (e_{B_2} f_{B_1}) - \partial_x (e_{s_2} f_{s_1}) \\ &\quad - (M_{A\nu_A} e_{A_1} - M_{B\nu_B} e_{B_1}) f_{r_2} + (M_{A\nu_A} e_{A_2} - M_{B\nu_B} e_{B_2}) f_{r_1} \\ &\quad - e_{s_1} (f_{\sigma_{A_2}} + f_{\sigma_{B_2}} + f_{\sigma_{S_2}} + f_{\sigma_{r_2}}) + f_{\sigma_{A_1}} e_{\sigma_{A_2}} + f_{\sigma_{B_1}} e_{\sigma_{B_2}} + f_{\sigma_{S_1}} e_{\sigma_{S_2}} + f_{\sigma_{r_1}} e_{\sigma_{r_2}} \end{aligned}$$

Avec la relation $\int_0^L E_2^T F_1 dx = \int_0^L (-E_1^T F_2) dx$ donné par (4.3.18), nous avons donc :

$$\begin{aligned} \int_0^L E_2^T F_1 &= - \int_0^L (f_{A_2} \partial_x e_{A_1} + f_{B_2} \partial_x e_{B_1} + f_{s_2} \partial_x e_{s_1} + e_{A_2} \partial_x f_{A_1} + e_{B_2} \partial_x f_{B_1} + e_{s_2} \partial_x f_{s_1}) dx \\ &\quad + [e_{A_1} f_{A_2}]_0^L + [e_{B_1} f_{B_2}]_0^L + [e_{s_1} f_{s_2}]_0^L + [e_{A_2} f_{A_1}]_0^L + [e_{B_2} f_{B_1}]_0^L + [e_{s_2} f_{s_1}]_0^L \\ &\quad + \int_0^L ((M_{A\nu_A} e_{A_1} - M_{B\nu_B} e_{B_1}) f_{r_2} - (M_{A\nu_A} e_{A_2} - M_{B\nu_B} e_{B_2}) f_{r_1} \\ &\quad + e_{s_1} (f_{\sigma_{A_2}} + f_{\sigma_{B_2}} + f_{\sigma_{S_2}} + f_{\sigma_{r_2}}) - f_{\sigma_{A_1}} e_{\sigma_{A_2}} - f_{\sigma_{B_1}} e_{\sigma_{B_2}} - f_{\sigma_{S_1}} e_{\sigma_{S_2}} - f_{\sigma_{r_1}} e_{\sigma_{r_2}}) dx \end{aligned}$$

Par hypothèse tous les termes frontières s'annulent :

$$\begin{aligned}
\int_0^L E_2^T F_1 &= \int_0^L (e_{A_2}(-\partial_x f_{A_1}) + e_{B_2}(-\partial_x f_{B_1}) + e_{s_2}(-\partial_x f_{s_1}) + f_{A_2}(-\partial_x e_{A_1}) + f_{B_2}(-\partial_x e_{B_1}) + f_{s_2}(-\partial_x e_{s_1})) dx \\
&\quad + \int_0^L ((M_A \nu_A e_{A_1} - M_B \nu_B e_{B_1}) f_{r_2} - (M_A \nu_A e_{A_2} - M_B \nu_B e_{B_2}) f_{r_1} \\
&\quad + e_{s_1}(f_{\sigma_{A_2}} + f_{\sigma_{B_2}} + f_{\sigma_{S_2}} + f_{\sigma_{r_2}}) - f_{\sigma_{A_1}} e_{\sigma_{A_2}} - f_{\sigma_{B_1}} e_{\sigma_{B_2}} - f_{\sigma_{S_1}} e_{\sigma_{S_2}} - f_{\sigma_{r_1}} e_{\sigma_{r_2}}) dx
\end{aligned}$$

Ainsi, nous avons :

$$\begin{aligned}
E_2^T F_1 &= e_{A_2}(-\partial_x f_{A_1} - M_A \nu_A f_{r_1}) + e_{B_2}(-\partial_x f_{B_1} + M_B \nu_B f_{r_1}) + e_{s_2}(-\partial_x f_{s_1}^s - f_{\sigma_{A_1}} - f_{\sigma_{B_1}} - f_{\sigma_{S_1}} - f_{\sigma_{r_1}}) \\
&\quad + f_{A_2}(-\partial_x e_{A_1}) + f_{B_2}(-\partial_x e_{B_1}) + f_{s_2}(-\partial_x e_{s_1}) \\
&\quad + f_{r_2}(\nu_A M_A e_{A_1} - \nu_B M_B e_{B_1}) + e_{s_1}(f_{\sigma_{A_2}} + f_{\sigma_{B_2}} + f_{\sigma_{S_2}} + f_{\sigma_{r_2}})
\end{aligned} \tag{4.3.19}$$

Par identification, nous trouvons pour F_1 :

$$F_1 = \begin{pmatrix} F_{A_1} = \partial_t \rho_{A_1} \\ F_{B_1} = \partial_t \rho_{B_1} \\ F_{s_1} = \rho \partial_t s_1 \\ E_{A_1} = -\partial_x e_{A_1} \\ E_{B_1} = -\partial_x e_{B_1} \\ E_{s_1} = -\partial_x e_{s_1} \\ E_{r_1} = \mathcal{A}_1 \\ e_{\sigma_{A_1}} = e_{s_1} \\ e_{\sigma_{B_1}} = e_{s_1} \\ e_{\sigma_{S_1}} = e_{s_1} \\ e_{\sigma_{r_1}} = e_{s_1} \end{pmatrix}^T \tag{4.3.20}$$

F_1 vérifie donc la structure donnée dans la proposition 13 .

Deuxièmement afin de finir la démonstration, nous considérons que la partie frontière n'est plus nulle, et nous allons démontrer que cette partie de d_1 vérifie aussi les propriétés de la structure de la proposition 13.

Nous remplaçons les équations (4.3.20) dans le produit symétrisé :

$$\begin{aligned}
&\int_0^L (-\partial_x(e_{A_1} f_{A_2}) - \partial_x(e_{B_1} f_{B_2}) - \partial_x(e_{s_1} f_{s_2}) - \partial_x(e_{A_2} f_{A_1}) - \partial_x(e_{B_2} f_{B_1}) - \partial_x(e_{s_2} f_{s_1})) dx \\
&\quad + [e_{\partial_1}^T f_{\partial_2} + e_{\partial_2}^T f_{\partial_1}]_L^0 = 0
\end{aligned}$$

soit :

$$-[e_{A_1} f_{A_2}]_0^L - [e_{B_1} f_{B_2}]_0^L - [e_{s_1} f_{s_2}]_0^L - [e_{A_2} f_{A_1}]_0^L - [e_{B_2} f_{B_1}]_0^L - [e_{s_2} f_{s_1}]_0^L + [e_{\partial_1}^T f_{\partial_2} + e_{\partial_2}^T f_{\partial_1}]_L^0 = 0 \tag{4.3.21}$$

Nous rappelons que les variables de port aux frontières satisfont :

$$e_{\partial 2}\{0, L\} = \begin{pmatrix} e_{\partial 2}^A \\ e_{\partial 2}^B \\ e_{\partial 2}^s \end{pmatrix} \Big|_{0,L} = \begin{pmatrix} e_{A_2} \\ e_{B_2} \\ e_{s_2} \end{pmatrix} \Big|_{0,L} \text{ et } f_{\partial 2}\{0, L\} = \begin{pmatrix} f_{\partial 2}^A \\ f_{\partial 2}^B \\ f_{\partial 2}^s \end{pmatrix} \Big|_{0,L} = \begin{pmatrix} f_A \\ f_B \\ f_s \end{pmatrix} \Big|_{0,L}$$

Nous avons donc :

$$-[e_{A_1} f_{A_2}]_0^L - [e_{B_1} f_{B_2}]_0^L - [e_{s_1} f_{s_2}]_0^L - [e_{A_2} f_{A_1}]_0^L - [e_{B_2} f_{B_1}]_0^L - [e_{s_2} f_{s_1}]_0^L + [e_{\partial 1}^A f_{A_2} + e_{\partial 1}^B f_{B_2} + e_{\partial 1}^s f_{s_2} + e_{A_2} f_{\partial 1}^A + e_{B_2} f_{\partial 1}^B + e_{s_2} f_{\partial 1}^s]_0^L = 0 \quad (4.3.22)$$

Cette équation doit être satisfaite pour tout $f_{\partial 2}$, $e_{\partial 2}$. Il vient donc

$$\begin{aligned} & f_{A_2}(L) (e_{\partial 1}^A(L) - e_{A_1}(L)) + f_{B_2}(L) (e_{\partial 1}^B(L) - e_{B_1}(L)) + \\ & f_{s_2}(L) (e_{\partial 1}^s(L) - e_{s_1}(L)) + e_{A_2}(L) (f_{\partial 1}^A(L) - f_{A_1}(L)) + \\ & e_{B_2}(L) (f_{\partial 1}^B(L) - f_{B_1}(L)) + e_{s_2}(L) (f_{\partial 1}^s(L) - f_{s_1}(L)) = 0 \end{aligned} \quad (4.3.23)$$

On a la même équation pour $x = 0$.

$$\text{Ainsi, nous obtenons facilement } f_{\partial 1} = \begin{pmatrix} f_{A_1} \\ f_{B_1} \\ f_{s_1} \end{pmatrix} \text{ et } e_{\partial 1} = \begin{pmatrix} e_{A_1} \\ e_{B_1} \\ e_{s_1} \end{pmatrix}$$

montrant que $d_1 \in \mathcal{D}$

• Troisièmement, il est facile de vérifier l'irréversibilité en utilisant la structure et la définition des variables de port :

$$\begin{aligned} -E^T \begin{pmatrix} 0_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0_4 & 0 \\ 0 & 0 & I_4 \end{pmatrix} F &= E^T \begin{pmatrix} 0_3 & 0 & 0 \\ 0 & I_4 & 0 \\ 0 & 0 & 0_4 \end{pmatrix} F \\ &= r\mathcal{A} - f_d^A \partial_x \mu_A - f_d^B \partial_x \mu_B - f^s \partial_x T > 0 \end{aligned} \quad (4.3.24)$$

□

Dans cette section nous avons obtenu au prix de l'ouverture de tous les éléments dissipatifs à une structure de Stokes-Dirac.

4.3.3 Représentation pseudo-hamiltonienne du modèle de réaction diffusion

Dans cette section, nous allons présenter une autre représentation du modèle de réaction diffusion qui ne sera que pseudo hamiltonienne dans la mesure où la matrice d'interconnexion dépend des variables d'effort ; on aura en particulier $P_0(e)$. Cette représentation peut s'avérer suffisante pour de la synthèse de commande par des méthodes basées sur la passivité [45].

TABLE 4.3 – Couples flux-effort en vision énergétique - représentation pseudo hamiltonienne

Flux	Efforts	Flux a la frontière	Efforts à la frontière
$F_A = \rho \partial_t \theta_A$	$e_A = \mu_A$	$f_\partial^A = f_A$	$e_\partial^A = e_A$
$F_B = \rho \partial_t \theta_B$	$e_B = \mu_B$	$f_\partial^B = f_B$	$e_\partial^B = e_B$
$F_s = \rho \partial_t s$	$e_s = T$	$f_\partial^s = f_s$	$e_\partial^s = e_s$
$f_A = F_{dis}^A$	$E_A = -\partial_x \mu_A$		
$f_B = F_{dis}^B$	$E_B = -\partial_x \mu_B$		
$f_s = F^s$	$E_s = -\partial_x T$		
$f_{\sigma_A} = -\sigma_A$	$e_{\sigma_A} = T$		
$f_{\sigma_B} = -\sigma_B$	$e_{\sigma_B} = T$		
$f_{\sigma_S} = -\sigma_s$	$e_{\sigma_S} = T$		
$f_{\sigma_r} = -\sigma_r$	$e_{\sigma_r} = T$		
$u = -\frac{q}{T}$	$y = T$		

Cette structure est basée sur le choix suivant de variables (4.3) :

En considérant les vecteurs $E \in \mathbf{E} = C^\infty(\mathcal{X})^{10}$ et $F \in \mathbf{F} = C^\infty(\mathcal{X})^{10}$:

$$\begin{aligned} E &= \left(e_A \quad e_B \quad e_s \quad f_A \quad f_B \quad f_s \quad f_{\sigma_A} \quad f_{\sigma_B} \quad f_{\sigma_S} \quad f_{\sigma_r} \right)^T \\ F &= \left(F_A \quad F_B \quad F_s \quad E_A \quad E_B \quad E_s \quad e_{\sigma_A} \quad e_{\sigma_B} \quad e_{\sigma_S} \quad e_{\sigma_r} \right)^T \end{aligned} \quad (4.3.25)$$

et avec les variables de port aux frontières suivantes :

$$e_\partial = \begin{pmatrix} e_\partial^A \\ e_\partial^B \\ e_\partial^s \end{pmatrix}, f_\partial = \begin{pmatrix} f_\partial^A \\ f_\partial^B \\ f_\partial^s \end{pmatrix} \quad (4.3.26)$$

nous avons :

$$\begin{pmatrix} e_\partial \\ f_\partial \end{pmatrix} (0, L) = \begin{pmatrix} I_3 & 0_3 & 0_{3 \times 4} \\ 0_3 & I_3 & 0_{3 \times 4} \end{pmatrix} E|_{0,L} \quad (4.3.27)$$

Comme précédemment nous définissons les ensembles $\mathcal{F} = \left\{ \begin{bmatrix} F \\ u \\ f_\partial \end{bmatrix} \in \mathbf{F} \times C^\infty(\mathcal{X}) \times \mathbb{R}^{3 \times \{0,L\}} \right\}$ ainsi que le produit bilinéaire :

$$\mathbb{R}^{3 \times \{0,L\}} \left\{ \begin{bmatrix} E \\ y \\ e_\partial \end{bmatrix} \in \mathbf{E} \times C^\infty(\mathcal{X}) \times \mathbb{R}^{3 \times \{0,L\}} \right\} \text{ ainsi que le produit bilinéaire :}$$

$$\left\langle \begin{bmatrix} E \\ y \\ e_\partial \end{bmatrix} \middle| \begin{bmatrix} F \\ u \\ f_\partial \end{bmatrix} \right\rangle := \langle E, F \rangle_{L^2} + \langle y, u \rangle_{L^2} + \langle e_\partial^L, f_\partial^L \rangle_{R^3} - \langle e_\partial^0, f_\partial^0 \rangle_{R^3} \quad (4.3.28)$$

avec

$$\begin{aligned}
\langle E, F \rangle_{L^2} &= \int_0^L (e_A F_A + e_B F_B + e_s F_s + E_A f_A + E_B f_B + E_s f_s \\
&\quad + e_{\sigma_A} f_{\sigma_A} + e_{\sigma_B} f_{\sigma_B} + e_{\sigma_S} f_{\sigma_S} + e_{\sigma_r} f_{\sigma_r}) dx \\
\langle u, y \rangle_{L^2} &= \int_0^L u y dx \\
\langle e_{\partial}^L, f_{\partial}^L \rangle_{R^3} &= e_{\partial}^A f_{\partial}^A + e_{\partial}^B f_{\partial}^B + e_{\partial}^s f_{\partial}^s
\end{aligned}$$

Le modèle de réaction-diffusion défini dans la sous-section (4.3.1) s'écrit sous la forme :

$$\begin{cases} F = JE + \mathcal{B}_e u \\ y = -\mathcal{B}_e^* E \end{cases} \quad (4.3.29)$$

avec

$$J = P_1 \partial_x + P_0(e), \quad P_1 = \begin{pmatrix} 0_3 & -I_3 & 0 \\ -I_3 & 0_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0_1 \end{pmatrix}, \quad P_0(e) = \begin{pmatrix} \mathcal{J}(e) & 0_3 & P \\ 0_3 & 0_3 & 0 \\ -P^T & 0 & 0_1 \end{pmatrix} \quad (4.3.30)$$

avec

$$\mathcal{J}(e) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\frac{\nu_A M_{Ar}}{T} \\ 0 & 0 & \frac{\nu_B M_{Br}}{T} \\ \frac{\nu_A M_{Ar}}{T} & -\frac{\nu_B M_{Br}}{T} & 0 \end{pmatrix} \quad (4.3.31)$$

La matrice P_1 est associée aux phénomènes de diffusion et diffusion thermique. Les trois premières lignes de P_1 correspondent à la divergence des flux dans les trois bilans. Les trois lignes suivantes correspondent aux gradients des efforts concernés dans les phénomènes. La partie réaction apparaît dans les deux lignes de la matrice antisymétrique \mathcal{J} .

Nous pouvons énoncer :

Proposition 14. *Le sous-ensemble $\mathcal{D} \subset \mathcal{E} \times \mathcal{F}$ définie par : $\mathcal{D} = \left\{ \left(\begin{bmatrix} F \\ u \\ f_{\partial} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} E \\ y \\ e_{\partial} \end{bmatrix} \right) \in \right.$*

$\mathcal{E} \times \mathcal{F} \mid F = JE + \mathcal{B}_e u$ avec $\mathcal{B}_e = \begin{pmatrix} \mathcal{B} \\ 0_{3 \times 1} \\ 0_{4 \times 1} \end{pmatrix}$ et $\mathcal{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$, $y = -\mathcal{B}_e^ E, \begin{pmatrix} e_{\partial} \\ f_{\partial} \end{pmatrix} (0, L) =$*

*$\left(\begin{pmatrix} I_3 & 0_{3 \times 3} & 0_{3 \times 4} \\ 0_{3 \times 3} & I_3 & 0_{3 \times 4} \end{pmatrix} E|_{0,L} \right) \Big\}$ est une structure **conservative** avec le produit de puissance (4.3.28).*

Démonstration. Nous écrivons le produit de puissance associé à la structure bilinéaire $\langle E, F \rangle_{L_2} = \langle E, JE \rangle_{L_2} + \langle E, J\mathcal{B}_e u \rangle_{L_2}$

Nous avons

$$\begin{aligned}
 \langle E, JE \rangle_{L_2} &= \int_0^L -(e_A(\partial_x f_A) + e_B(\partial_x f_B) + e_s(\partial_x f_s)) dx \\
 &\quad \int_0^L -(f_A(\partial_x e_A) + f_B(\partial_x e_B) + f_s(\partial_x e_s)) dx \\
 &= \int_0^L -(\partial_x(e_A f_A + e_B f_B + e_s f_s)) dx \\
 &= -e_\partial^T f_\partial|_L + e_\partial^T f_\partial|_0 \\
 &= -\langle e_\partial|_L, f_\partial|_L \rangle_{R_3} + \langle e_\partial|_0, f_\partial|_0 \rangle_{R_3}
 \end{aligned} \tag{4.3.32}$$

Ainsi, nous avons

$$\langle E, JE \rangle_{L_2} + \langle E, \mathcal{B}_e u \rangle_{L_2} + \langle e_\partial, f_\partial \rangle_{R_3} = 0 \tag{4.3.33}$$

Comme $\langle E, \mathcal{B}_e u \rangle_{L_2} = \langle \overbrace{-\mathcal{B}_e^* E}^y, u \rangle_{L_2}$ Le produit de puissance total comprenant le flux de puissance externe distribué est :

$$\langle E, F \rangle_{L_2} + \langle y, u \rangle_{L_2} + \langle e_\partial, f_\partial \rangle_{R_3} = 0 \tag{4.3.34}$$

□

Ce résultat montre que l'énergie du système est conservative.

4.3.4 Conclusion

Dans cette section nous nous sommes intéressé à la représentation hamiltonienne des systèmes en vision énergétique.

Nous avons vu en section 4.3.2 que par une extension des variables de flux et d'effort on définit une structure antisymétrique qui traduit la conservation de l'énergie totale du système. Ces extensions correspondent aux variables de ports liées à la dissipation ainsi qu'à la production irréversible d'entropie. La structure antisymétrique couplée avec les relations constitutives sur les différents ports permettent de déduire directement le caractère irréversible du système. En section 4.3.3 la représentation pseudo hamiltonienne montre que ces extensions de variables de port ne sont pas nécessaires lorsqu'on laisse les ports dissipatifs fermés.

4.4 Représentation hamiltonienne à port en vision entropique

Nous allons reprendre ce même type d'extension pour obtenir une représentation hamiltonienne à port d'un système 1D réaction-diffusion défini sur l'intervalle $[0, L]$ présenté par (4.4.1) :

$$\frac{\partial z}{\partial t} = (\mathcal{J} - \mathcal{G}^* D \mathcal{G}) \frac{\delta H}{\delta z} + \mathcal{B}u \quad (4.4.1)$$

où $z(t, x) = (q \ p)$ est la variable d'état du système, $u(t, x) \in C^\infty(\mathcal{Z})$ est la variable de commande distribuée, \mathcal{J} est un opérateur différentiel antisymétrique $\mathcal{J} = P_1 \frac{\partial}{\partial z} + P_0$ avec P_1 une matrice symétrique et P_0 une matrice antisymétrique, \mathcal{G} est un opérateur différentiel et \mathcal{B} est un opérateur linéaire, D est une matrice non négative et $H(x)$ est l'hamiltonien du système.

Comme pour la section précédente, nous rappelons le modèle dynamique considéré puis nous donnons une représentation hamiltonienne du système et une représentation pseudo hamiltonienne.

4.4.1 Formulation entropique du modèle réaction-diffusion

Avec les mêmes lois constitutives et les mêmes notations que celles présentées dans la section 4.3.1, nous obtenons le modèle suivant :

$$\begin{aligned} \rho \partial_t \theta_A &= -\partial_x F_{dis}^A - M_A \nu_A r \\ \rho \partial_t \theta_B &= -\partial_x F_{dis}^B + M_B \nu_B r \\ \rho \partial_t h &= -\partial_x F^h + q \end{aligned} \quad (4.4.2)$$

où $h = u + P \frac{1}{\rho}$ est l'enthalpie massique et $F^h = F_{dis}^h + f_{cond}^h$ est le flux total d'enthalpie, $F_{dis}^h = \sum_{i=A,B} F_{dis}^i h_i$ est le flux d'enthalpie dû à la diffusion et $f_{cond}^h = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}$ est le flux de diffusion thermique. h_i est l'enthalpie massique partielle de l'espèce i .

En utilisant la relation $\mu_i = h_i - T s_i$ et avec des simplifications, la production irréversible d'entropie (4.3.5) peut s'écrire aussi comme :

$$\sigma = \overbrace{q \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_j} \right)}^{\sigma_{ext}} + \overbrace{r \left(\frac{\mu_A}{T} M_A \nu_A - \frac{\mu_B}{T} M_B \nu_B \right)}^{\sigma_r} + \overbrace{f_d^A \partial_x \left(-\frac{\mu_A}{T} \right)}^{\check{\sigma}_A} + \overbrace{f_d^B \partial_x \left(-\frac{\mu_B}{T} \right)}^{\check{\sigma}_B} + \overbrace{f^h \partial_x \frac{1}{T}}^{\check{\sigma}_H} \quad (4.4.3)$$

4.4.2 Représentation hamiltonienne du modèle réaction-diffusion en vision entropique

Cette représentation est basée sur l'équation de Gibbs en vision entropique (1.2.15) : $ds = \frac{1}{T} dh - \sum \frac{\mu_i}{T} \theta_i$ en prenant $-s$ comme hamiltonien.

En prenant la même méthodologie que pour la vision énergétique pour définir les couples de variables effort-flux duales au sens de notre hamiltonien nous obtenons les couples donnés dans le tableau 4.4.

En considérant les vecteurs E et F comme suit :

$$E = \begin{pmatrix} e_A & e_B & e_h & f_A & f_B & f_h & f_r \end{pmatrix}^T \quad (4.4.4)$$

$$F = \begin{pmatrix} F_A & F_B & F_h & E_A & E_B & E_h & e_r \end{pmatrix}^T \quad (4.4.5)$$

TABLE 4.4 – Les couples flux effort en vision entropique

Flux	Efforts	Flux à la frontière	Efforts à la frontière
$F_A = \rho \partial_t \theta_A$	$e_A = \frac{\mu_A}{T}$	$f_\partial^A = f_A$	$e_\partial^A = e_A$
$F_B = \rho \partial_t \theta_B$	$e_B = \frac{\mu_B}{T}$	$f_\partial^B = f_B$	$e_\partial^B = e_B$
$F_h = \rho \partial_t h$	$e_h = -\frac{1}{T}$	$f_\partial^h = f_h$	$e_\partial^h = e_h$
$f_A = F_{dis}^A$	$E_A = -\partial_x \left(\frac{\mu_A}{T} \right)$		
$f_B = F_{dis}^B$	$E_B = -\partial_x \left(\frac{\mu_B}{T} \right)$		
$f_h = F^h$	$E_h = -\partial_x \left(\frac{-1}{T} \right)$		
$f_r = r$	$e_r = \frac{A}{T}$		
$u = -q$	$y = \frac{1}{T}$		

Avec $E \in \mathbf{E} = (C^\infty(\mathcal{X}))^7$ et $F \in \mathbf{F} = (C^\infty(\mathcal{X}))^7$

et avec les variables de port aux frontières suivantes :

$$e_\partial = \begin{pmatrix} e_\partial^A \\ e_\partial^B \\ e_\partial^h \end{pmatrix}, f_\partial = \begin{pmatrix} f_\partial^A \\ f_\partial^B \\ f_\partial^h \end{pmatrix} \quad (4.4.6)$$

nous avons :

$$\begin{pmatrix} e_\partial \\ f_\partial \end{pmatrix} (0, L) = \begin{pmatrix} I_3 & 0_3 & 0_{3 \times 1} \\ 0_3 & I_3 & 0_{3 \times 1} \end{pmatrix} E|_{0,L} \quad (4.4.7)$$

Soient les ensembles $\mathcal{F} = \left\{ \begin{bmatrix} F \\ u \\ f_\partial \end{bmatrix} \in \mathbf{F} \times C^\infty(\mathcal{X}) \times \mathbb{R}^{3 \times \{0,L\}} \right\}$ et $\mathcal{E} = \left\{ \begin{bmatrix} E \\ y \\ e_\partial \end{bmatrix} \in \mathbf{E} \times C^\infty(\mathcal{X}) \times \mathbb{R}^{3 \times \{0,L\}} \right\}$ ainsi que le produit de dualité :

$$\left\langle \begin{bmatrix} E \\ y \\ e_\partial \end{bmatrix} \mid \begin{bmatrix} F \\ u \\ f_\partial \end{bmatrix} \right\rangle := \langle E, F \rangle_{L^2} + \langle y, u \rangle_{L^2} + \langle e_\partial^L, f_\partial^L \rangle_{R^3} - \langle e_\partial^0, f_\partial^0 \rangle_{R^3} \quad (4.4.8)$$

avec

$$\langle E, F \rangle_{L^2} = \int_0^L (e_A F_A + e_B F_B + e_h F_h + E_A f_A + E_B f_B + E_h f_h + E_r f_r) dx$$

$$\langle u, y \rangle_{L^2} = \int_0^L u y dx$$

$$\langle e_\partial^L, f_\partial^L \rangle_{R^3} = e_\partial^A f_\partial^A + e_\partial^B f_\partial^B + e_\partial^h f_\partial^h$$

Le système (4.4.2) sous forme hamiltonienne compact s'écrit donc :

$$\begin{cases} F = JE + \mathcal{B}_e u \\ y = -\mathcal{B}_e^* E \end{cases} \quad (4.4.9)$$

où J est un opérateur antisymétrique donné par :

$$J = P_1 \partial_x + P_0, \text{ avec } P_1 = \begin{pmatrix} 0_3 & -I_3 & 0 \\ -I_3 & 0_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, P_0 = \begin{pmatrix} 0_3 & 0_3 & P \\ 0_3 & 0_3 & 0 \\ -P^T & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ et } P = \begin{pmatrix} -\nu_A M_A \\ \nu_B M_B \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.4.10)$$

L'opérateur d'entrée est donné par :

$$\mathcal{B}_e = \begin{pmatrix} \mathcal{B} \\ 0_3 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ avec } \mathcal{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.4.11)$$

$$\text{avec } \mathcal{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Nous pouvons énoncer :

Proposition 15. *Le sous-ensemble linéaire $\mathcal{D} \subset \mathcal{E} \times \mathcal{F}$ est définie par : $\mathcal{D} = \left\{ \left(\begin{bmatrix} F \\ u \\ f_\partial \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} E \\ y \\ e_\partial \end{bmatrix} \right) \in \mathcal{E} \times \mathcal{F} \mid F = JE + \mathcal{B}_e u, y = -\mathcal{B}_e^* E \text{ et } \begin{pmatrix} e_\partial \\ f_\partial \end{pmatrix} (0, L) = \begin{pmatrix} I_3 & 0_3 & 0_{3 \times 1} \\ 0_3 & I_3 & 0_{3 \times 1} \end{pmatrix} E|_{0,L} \right\}$ est une structure Stokes Dirac structure par rapport au produit symétrisé (4.2.8) construit à partir du produit de dualité (4.4.8).*

La preuve de la proposition est omise car elle est en tout point semblable à celle de la proposition 13

4.4.3 Représentation pseudo hamiltonienne du modèle réaction-diffusion

Comme précédemment en laissant le port de réaction fermé nous obtenons une représentation pseudo -hamiltonienne. Nous choisissons les variables données dans le tableau 4.5 :

En considérant les vecteurs E et F comme suit :

$$E = \begin{pmatrix} e_A & e_B & e_h & f_A & f_B & f_h \end{pmatrix}^T \quad (4.4.12)$$

$$F = \begin{pmatrix} F_A & F_B & F_h & E_A & E_B & E_h \end{pmatrix}^T \quad (4.4.13)$$

Avec $E \in \mathbf{E} = (C^\infty(\mathcal{X}))^6$ et $F \in \mathbf{F} = (C^\infty(\mathcal{X}))^6$

TABLE 4.5 – Les couples flux effort en vision entropique- représentation pseudo hamiltonienne

Flux	Efforts	Flux à la frontière	Efforts à la frontière
$F_A = \rho \partial_t \theta_A$	$e_A = \frac{\mu_A}{T}$	$f_{\partial}^A = f_A$	$e_{\partial}^A = e_A$
$F_B = \rho \partial_t \theta_B$	$e_B = \frac{\mu_B}{T}$	$f_{\partial}^B = f_B$	$e_{\partial}^B = e_B$
$F_h = \rho \partial_t h$	$e_h = -\frac{1}{T}$	$f_{\partial}^h = f_h$	$e_{\partial}^h = e_h$
$f_A = F_{dis}^A$	$E_A = -\partial_x \left(\frac{\mu_A}{T} \right)$		
$f_B = F_{dis}^B$	$E_B = -\partial_x \left(\frac{\mu_B}{T} \right)$		
$f_h = F^h$	$E_h = -\partial_x \left(\frac{-1}{T} \right)$		
$u = -q$	$y = \frac{1}{T}$		

et avec les variables de port aux frontières suivantes :

$$e_{\partial} = \begin{pmatrix} e_{\partial}^A \\ e_{\partial}^B \\ e_{\partial}^h \end{pmatrix}, f_{\partial} = \begin{pmatrix} f_{\partial}^A \\ f_{\partial}^B \\ f_{\partial}^h \end{pmatrix} \quad (4.4.14)$$

nous avons :

$$\begin{pmatrix} e_{\partial} \\ f_{\partial} \end{pmatrix} (0, L) = \begin{pmatrix} I_3 & 0_3 \\ 0_3 & I_3 \end{pmatrix} E|_{0,L} \quad (4.4.15)$$

Soient les ensembles $\mathcal{F} = \left\{ \begin{bmatrix} F \\ u \\ f_{\partial} \end{bmatrix} \in \mathbf{F} \times C^{\infty}(\mathcal{X}) \times \mathbb{R}^{3 \times \{0,L\}} \right\}$ et $\mathcal{E} = \left\{ \begin{bmatrix} E \\ y \\ e_{\partial} \end{bmatrix} \in \mathbf{E} \times C^{\infty}(\mathcal{X}) \times \mathbb{R}^{3 \times \{0,L\}} \right\}$ ainsi que le produit de dualité :

$$\left\langle \begin{bmatrix} E \\ y \\ e_{\partial} \end{bmatrix} \mid \begin{bmatrix} F \\ u \\ f_{\partial} \end{bmatrix} \right\rangle := \langle E, F \rangle_{L^2} + \langle y, u \rangle_{L^2} + \langle e_{\partial}^L, f_{\partial}^L \rangle_{R^3} - \langle e_{\partial}^0, f_{\partial}^0 \rangle_{R^3} \quad (4.4.16)$$

avec

$$\langle E, F \rangle_{L^2} = \int_0^L (e_A F_A + e_B F_B + e_h F_h + E_A f_A + E_B f_B + E_h f_h) dx$$

$$\langle u, y \rangle_{L^2} = \int_0^L u y dx$$

$$\langle e_{\partial}^L, f_{\partial}^L \rangle_{R^3} = e_{\partial}^A f_{\partial}^A + e_{\partial}^B f_{\partial}^B + e_{\partial}^h f_{\partial}^h$$

Le système (4.4.2) sous forme hamiltonienne compact s'écrit donc :

$$\begin{cases} F = (J - R)E + \mathcal{B}_e u \\ y = -\mathcal{B}_e^* E \end{cases} \quad (4.4.17)$$

avec

$$J = P_1 \partial_x + P_0(e), \quad P_1 = \underbrace{\begin{pmatrix} 0_3 & -I_3 \\ -I_3 & 0_3 \end{pmatrix}}_{P_1}, \quad P_0(e) = \begin{pmatrix} \mathcal{J}(e) & 0_3 \\ 0_3 & 0_3 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{J}(e) = \alpha \frac{rT}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.4.18)$$

$$R = \begin{pmatrix} \mathcal{R}(e) & 0_3 \\ 0_3 & 0_3 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{R}(e) = \begin{pmatrix} \frac{rT}{2} \frac{M_A \nu_A}{\mu_A} & \frac{rT}{2} \beta & 0 \\ \frac{rT}{2} \beta & -rT \frac{M_B \nu_B}{\mu_B} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.4.19)$$

$$\text{où } \alpha = \frac{M_A \nu_A}{2\mu_A} + \frac{M_B \nu_B}{2\mu_B}, \quad \beta = -\frac{M_A \nu_A}{2\mu_A} + \frac{M_B \nu_B}{2\mu_B}.$$

et l'opérateur d'entrée

$$\mathcal{B}_e = \begin{pmatrix} \mathcal{B} \\ 0_3 \end{pmatrix} \text{ avec } \mathcal{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (4.4.20)$$

Remarque 4.3. Pour cette représentation, nous avons décomposé les termes de réaction en deux parties : une partie antisymétrique définie par $\mathcal{J}(e)$ et une partie symétrique définie par $\mathcal{R}(e)$. Le produit de puissance concernant la partie antisymétrique est nul et celui de la partie symétrique est égale à l'opposé de la production irréversible d'entropie due à la réaction, ce qui montre que la réaction est dissipative.

Nous avons :

Proposition 16. Le sous-ensemble linéaire $\mathcal{D} \subset \mathcal{E} \times \mathcal{F}$ définie par : $\mathcal{D} = \left\{ \left(\begin{bmatrix} F \\ u \\ f_\partial \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} E \\ y \\ e_\partial \end{bmatrix} \right) \in \right.$

$$\mathcal{E} \times \mathcal{F} \mid F = JE + \begin{pmatrix} \mathcal{B} \\ 0_3 \end{pmatrix} u \text{ avec } \mathcal{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad y = -[\mathcal{B}^* \quad 0_3]E \text{ et les variables de port à}$$

la frontière $\begin{pmatrix} e_\partial \\ f_\partial \end{pmatrix} (0, L) = \begin{pmatrix} I_3 & 0_3 \\ 0_3 & I_3 \end{pmatrix} E|_{0,L} \Big\}$ définit un système pseudo-hamiltonien avec dissipation.

Démonstration. Nous calculons le produit de puissance définie par $\langle E, JE \rangle_{L_2}$:

$$\begin{aligned}
\langle E, JE \rangle_{L_2} &= \int_0^L -(e_A(\partial_x f_A) + e_B(\partial_x f_B) + e_h(\partial_x f_h)) dx \\
&= \int_0^L -(f_A(\partial_x e_A) + f_B(\partial_x e_B) + f_h(\partial_x e_h)) dx \\
&= \int_0^L -(\partial_x (e_A f_A + e_B f_B + e_h f_h)) dx \\
&= -e_\partial^T f_\partial|_L + e_\partial^T f_\partial|_0 \\
&= -\langle e_\partial|_L, f_\partial|_L \rangle_{R_3} + \langle e_\partial|_0, f_\partial|_0 \rangle_{R_3}
\end{aligned} \tag{4.4.21}$$

Ainsi, nous avons

$$\langle E, JE \rangle_{L_2} + \langle e_\partial, f_\partial \rangle_{R_3} = 0 \tag{4.4.22}$$

Le produit de puissance totale avec le flux de puissance externe distribué est :

$$\langle E, F \rangle_{L_2} + \langle y, u \rangle_{L_2} + \langle e_\partial, f_\partial \rangle_{R_3} = 0 \tag{4.4.23}$$

Ce résultat montre la partie conservative du système.

Maintenant nous étudions la partie dissipation définie par la matrice symétrique R en calculant $\langle E, RE \rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle E, RE \rangle_{L_2} &= \int_0^L \underbrace{\left(e_A \frac{rT}{2} \frac{M_A \nu_A}{\mu_A} e_A + e_A \frac{rT}{2} \beta e_B + e_B \frac{rT}{2} \beta e_A - e_B \frac{rT}{2} \frac{M_B \nu_B}{\mu_B} e_B \right)}_{R_1} dx \\
&\quad \underbrace{\int_0^L \left(-f_d^A \partial_x \left(\frac{\mu_A}{T} \right) - f_d^B \partial_x \left(\frac{\mu_B}{T} \right) + f_d^h \partial_x \left(\frac{1}{T} \right) \right)}_{R_2} dx
\end{aligned} \tag{4.4.24}$$

Nous constatons que R_1 est la partie réaction de la production irréversible d'entropie et R_2 est la partie diffusion.

Ce résultat montre que la partie dissipative du système correspond à $-\sigma$

□

Remarque 4.4. Pour avoir une structure de Stokes-Dirac basée sur cette formulation pseudo-hamiltonienne, nous pouvons faire des hypothèses sur la cinétique de réaction qui pourra être affine par rapport aux variables intensives afin que des variables d'effort n'interviennent plus dans la structure.

Plus précisément, en vision énergétique r est affine à la température $r = T\bar{r}(x)$ et x est le vecteur des variables d'état, et en vision entropique r est affine à l'affinité chimique $r = \mathcal{A}\bar{r}(x)$. Par ces moyens, des variables d'effort n'interviennent plus dans la matrice \mathcal{J} , donc nous avons une structure de Stokes-Dirac.

4.4.4 Conclusion

Dans cette section nous avons étudié la représentation hamiltonienne du modèle réaction-diffusion en vision entropique. Cette fois l'hamiltonien est l'opposé de l'entropie et l'énergie est une variable d'état. Par des extensions adéquates des variables de flux et d'effort, le bilan d'entropie est vérifiée. Dans le cas où les ports résistifs sont ouverts, nous retrouvons une structure purement conservative. Dans le cas où le port résistif du à la réaction est fermé, nous retrouvons un système pseudo hamiltonien avec dissipation. Le caractère pseudo hamiltonien provient du fait que la structure dépend des variables d'effort tel que la température. Ceci est du à la forme des lois constitutives couramment utilisé pour représenter la réaction chimique.

4.5 Conclusion et perspectives

Dans ce chapitre, nous avons proposé une formulation hamiltonienne à port pour un modèle diffusion-réaction siège d'une réaction de type $A \Rightarrow B$. Nous avons montré comment les phénomènes de diffusion et réactions chimiques donnés dans la représentation hamiltonienne à port en utilisant une structure Stokes-Dirac. Dans les deux cas, la dissipation du système est liée à la production irréversible d'entropie due à la réaction, la diffusion et la diffusion thermique.

Les résultats obtenus sont encourageants. Cependant la prise en compte du phénomène de convection reste encore ouverte.

Chapitre 5

Problème de commande à la frontière

5.1 Motivation et mes contributions

Dans le chapitre 3, nous avons utilisé la disponibilité thermodynamique pour la synthèse d'une loi de commande stabilisante distribuée dans l'espace (en utilisant la température de la double enveloppe). D'un point de vue pratique les réacteurs tubulaires sont cependant souvent commandés à la frontière en utilisant comme variables de commande la température, le débit et la composition d'alimentation. Nous pouvons citer par exemple [33, 34, 23, 20] où un profil d'équilibre est stabilisé par le biais des débits d'entrée du réacteur. D'un point de vue théorique les problèmes de commande à la frontière sont plus difficiles à traiter car ils font appel à des opérateurs d'entrée non bornés et le problème d'existence de solutions reste d'un point de vue général un problème ouvert. Dans le cas linéaire il a été cependant démontré [59, 84] que la formulation Hamiltonienne à ports permettait d'établir des conditions matricielles simples à vérifier pour garantir l'existence et la contractivité des solutions d'un système commandé à la frontière. L'objectif de ce chapitre est d'étudier l'existence de solutions associées à un modèle linéarisé de réacteur tubulaire complet commandé à la frontière. Pour cela nous présentons dans un premier temps les outils théoriques associés à l'analyse des systèmes Hamiltonien linéaires dissipatifs de dimension infinie commandés à la frontière. Ces outils reposent sur une extension de l'opérateur différentiel et l'utilisation de relations de fermeture sur les variables étendues. Nous utilisons ensuite un modèle simplifié de réacteur tubulaire isotherme pour montrer l'impact de cette paramétrisation (extension+ équation de fermeture) sur l'analyse d'existence de solutions. Cet exemple illustrera l'importance du choix des variables étendues et de l'aspect canonique de la structure d'interconnexion. Dans un second temps nous étudions le modèle linéarisé du réacteur tubulaire au voisinage d'un profil d'équilibre. Nous montrons que le modèle linéarisé fait apparaître des équations de fermeture dépendant de l'espace. Dans ce cas, bien que la factorisation fasse apparaître une structure canonique d'interconnexion, la condition de positivité associée aux équations de fermeture reste difficile à vérifier, même numériquement.

5.2 Systèmes Hamiltoniens à ports dissipatifs

Nous considérons ici une classe de systèmes linéaires à paramètres distribués composés d'une partie réversible associée à un opérateur antisymétrique \mathcal{J} et une partie dissipative irréversible associée à un opérateur symétrique non négatif \mathcal{R} . Ce phénomène irréversible est décrit par le biais de relations constitutives définies par l'opérateur S agissant sur des variables d'état étendues via l'application linéaire \mathcal{G} . Ainsi le système est écrit sous la forme générale suivante :

$$\begin{aligned}\frac{\partial z}{\partial t}(t, x) &= (\mathcal{J} - \mathcal{G}S\mathcal{G}^*)\mathcal{L}z(t, x) \\ u(t) &= \mathcal{B}z(t, x), \\ y(t) &= \mathcal{C}z(t, x) \\ z(0, x) &= z_0(x)\end{aligned}$$

où S et \mathcal{L} sont des opérateurs définis coercifs sur $L_2((a, b), \mathbb{R}^n)$. Les opérateurs \mathcal{B} et \mathcal{C} , sont des opérateurs d'entrée et de sortie.

L'opérateur différentiel antisymétrique \mathcal{J} est défini de la manière suivante :

$$\mathcal{J}x = \sum_i^N P_i \frac{\partial^i x}{\partial z^i} \quad (5.2.1)$$

où P_i est une matrice réelle définie sur $\mathbb{R}^{(n \times n)}$ qui satisfait $P_i = (-1)^{i+1} P_i^T$.

L'opérateur \mathcal{G} et son dual \mathcal{G}^* sont définis par :

$$\mathcal{G}x = \sum_i^N G_i \frac{\partial^i x}{\partial z^i}, \mathcal{G}^*x = \sum_i^N (-1)^i G_i^T \frac{\partial^i x}{\partial z^i} \quad (5.2.2)$$

avec G_i est une matrice réelle définie sur $\mathbb{R}^{(m \times n)}$.

En utilisant l'extension des variables d'effort et la définition des équations de fermeture via l'opérateur S le système (5.2.1) devient :

$$\begin{pmatrix} f \\ f_r \end{pmatrix} = \mathcal{J}_e \begin{pmatrix} e \\ e_r \end{pmatrix} \quad (5.2.3)$$

avec :

$$\mathcal{J}_e = \begin{pmatrix} \mathcal{J} & \mathcal{G} \\ -\mathcal{G}^* & 0 \end{pmatrix} \quad (5.2.4)$$

Cet opérateur explicite la structure d'interconnexion associée aux flux d'énergie dans le système [32]. Dans notre cas en considérant la relation constitutive linéaire associée aux phénomènes dissipatifs irréversibles, nous avons :

$$e_r = S f_r, \quad S + S^* \geq 0 \quad (5.2.5)$$

Proposition 17. [59] *L'opérateur \mathcal{J}_e défini par (5.2.4), (5.2.1), et (5.2.2) est antisymétrique et s'écrit :*

$$\mathcal{J}_e \begin{pmatrix} e \\ e_r \end{pmatrix} = \sum_{i=0}^N \overbrace{\begin{bmatrix} P_i & G_i \\ (-1)^{(i+1)} G_i^T & 0 \end{bmatrix}}^{\tilde{P}_i} \frac{\partial^i}{\partial x^i} \begin{pmatrix} e \\ e_r \end{pmatrix} \quad (5.2.6)$$

avec

$$\tilde{P}_i = (-1)^{i+1} \tilde{P}_i^T \quad (5.2.7)$$

où \tilde{P}_N n'est pas forcément de rang plein.

Théorème 18. [59] \mathcal{J}_e est un opérateur antisymétrique défini par (5.2.4), et $H^N((a; b); \mathbf{R}^{2n})$ dénote l'espace de Sobolev des fonctions différentiables ordre N sur l'intervalle (a, b) . Ainsi pour deux fonctions quelconques $e_{e,i} = \begin{pmatrix} e_1 \\ e_r \end{pmatrix} \in H^N((a; b); \mathbf{R}^{2n}), i \in \{1, 2\}$, nous avons donc :

$$\int_a^b (e_{e,1}^T(x)(\mathcal{J}_e e_{e,2})(x) + e_{e,2}^T(x)(\mathcal{J}_e e_{e,1})(x)) dx \quad (5.2.8)$$

$$= \left[\begin{pmatrix} e_{e,1}^T(x) & \dots & \frac{d^{N-1} e_{e,1}^T}{d^{N-1}}(x) \end{pmatrix} \tilde{Q} \begin{pmatrix} e_{e,2}^T(x) \\ \dots \\ \frac{d^{N-1} e_{e,2}^T}{d^{N-1}}(x) \end{pmatrix} \right]_a^b \quad (5.2.9)$$

où

$$\tilde{Q} = \begin{pmatrix} \tilde{P}_1 & \tilde{P}_2 & \tilde{P}_3 & \dots & \tilde{P}_{N-1} & \tilde{P}_N \\ -\tilde{P}_2 & -\tilde{P}_3 & -\tilde{P}_4 & \dots & -\tilde{P}_N & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ (-1)^{N-1} \tilde{P}_N & 0 & \dots & \dots & & 0 \end{pmatrix} \quad (5.2.10)$$

avec \tilde{P}_i donné par (5.2.7). \tilde{Q} est une matrice symétrique non singulière.

Dans le cas où \tilde{P}_N n'est pas de rang plein, nous définissons la matrice \tilde{Q}_1 qui permettra de définir une structure géométrique non dégénérée. Pour cela nous utilisons M une base de l'ensemble image de \tilde{Q} et définissons $\tilde{Q}_1 = M^T \tilde{Q} M$, $M_{\tilde{Q}} = (M^T M)^{-1} M^T$.

La matrice R_{ext} issue de cette paramétrisation est définie par :

$$R_{ext} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \tilde{Q}_1 & -\tilde{Q}_1 \\ I & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{\tilde{Q}} & 0 \\ 0 & M_{\tilde{Q}} \end{pmatrix} \quad (5.2.11)$$

où $I \in \mathbb{R}^{(n+m)N \times (n+m)N}$ est la matrice identité.

Définition 5.1. *Les variables de port aux frontières associées à l'opérateur différentiel \mathcal{J}_e sont les vecteurs $e_{e,\partial}, f_{e,\partial} \in \mathcal{R}^{2nN}$ définis par :*

$$\begin{pmatrix} f_{e,\partial} \\ e_{e,\partial} \end{pmatrix} = R_{ext} \begin{pmatrix} e_e(b) \\ \vdots \\ \frac{d^{N-1}e_e}{dz^{N-1}}(b) \\ e_e(a) \\ \vdots \\ \frac{d^{N-1}e_e}{dz^{N-1}}(a) \end{pmatrix} \quad (5.2.12)$$

où $e_e^T = (e, -S\mathcal{G}^*e)$ est un vecteur étendu des variables d'effort.

Le théorème suivant donne la condition de positivité qui doit être satisfaite pour assurer l'existence de solution et pour définir un système de commande aux frontières.

Théorème 19. [58] *Soit W une matrice de rang plein de dimensions $(n+m)N \times 2(n+m)N$ satisfaisant $W\Sigma W^T \geq 0$, où $\Sigma = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}$. Le système*

$$\frac{\partial z}{\partial t}(x, t) = (\mathcal{J} - \mathcal{G}_R S \mathcal{G}_R^*) \mathcal{L}z(t, x) \quad (5.2.13)$$

ayant pour entrée

$$u(t) = W \begin{pmatrix} f_{e,\partial} \\ e_{e,\partial} \end{pmatrix} \quad (5.2.14)$$

est un système de commande frontière dissipatif et l'opérateur $A = (\mathcal{J} - \mathcal{G}_R S \mathcal{G}_R^)$ ayant pour domaine :*

$$D(A) = \left\{ e \in H^N((a, b); \mathbb{R}^n) \mid S\mathcal{G}_R^*e \in H^N((a, b); \mathbb{R}^n), \right. \\ \left. \begin{pmatrix} f_{f,\partial} \\ f_{e,\partial} \end{pmatrix} \in \ker W \right\}. \quad (5.2.15)$$

génère un semi-groupe de contraction.

Dans le cas des systèmes conservatifs de puissance ($S = 0$) une condition nécessaire et suffisante d'existence de solution est la condition $W\Sigma W^T \geq 0$. Dans le cas des systèmes avec dissipation cette condition devient une condition suffisante. Ce point est discuté dans [56, 55]. On retiendra que dans le cas qui nous préoccupe l'existence de solution est associée au fait que les deux conditions suivantes sont simultanément satisfaites (conditions suffisantes) :

1. $S + S^* \geq 0$
2. $W\Sigma W^T \geq 0$

Dans ce qui suit, nous étudions l'impact de la factorisation de l'opérateur \mathcal{R} sous la forme $\mathcal{G}S\mathcal{G}^*$ sur l'analyse d'existence de solutions.

5.3 Existence de solution : Application aux systèmes isothermes

Dans cette section, nous considérons un réacteur tubulaire isotherme sous forme :

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho_A}{\partial x^2} - v \frac{\partial \rho_A}{\partial x} - k \rho_A \quad (5.3.1)$$

Cela revient à considérer que les termes de réaction, de convection, et de dispersion sont linéaires à variable d'espace $x \in [a, b]$. D , v , k sont choisies constantes en temps et ne dépendant pas de la variable d'espace. Dans ce qui suit nous étudions l'existence de solutions de ce système en fonction de la factorisation de l'opérateur différentiel. Dans le premier cas, cet opérateur est non canonique et dépend des paramètres du système. Dans le second cas la factorisation met en œuvre des opérateurs différentiels canoniques.

L'existence de solutions dans un cas particuliers de conditions frontières a aussi été montré dans ce cas dans [89].

5.3.1 Cas A : Opérateurs différentiels non canoniques

L'objectif est d'écrire l'opérateur différentiel sous la forme :

$$D \frac{\partial^2 \rho_A}{\partial x^2} - v \frac{\partial \rho_A}{\partial x} - k \rho_A = \mathcal{J} - \mathcal{G}S\mathcal{G}^*$$

où \mathcal{J} est formellement anti-symétrique. Le choix le plus simple est de considérer :

$$\mathcal{J} = -v \frac{\partial}{\partial x} \quad \text{et} \quad -\mathcal{G}S\mathcal{G}^* = \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{k}{D}$$

Soit

$$\mathcal{G} = \frac{\partial}{\partial x} + \sqrt{\frac{k}{D}}, \quad \mathcal{G}^* = -\frac{\partial}{\partial x} + \sqrt{\frac{k}{D}}, \quad S = D$$

Dans ce cas la condition $S + S^* \geq 0$ est triviale car le paramètre D est par définition positif.

Le système étendu s'écrit alors :

$$\begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -v \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial x} + \sqrt{\frac{k}{D}} \\ \frac{\partial}{\partial x} - \sqrt{\frac{k}{D}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \end{pmatrix} \quad (5.3.2)$$

Avec

$$\begin{aligned} f_1 &= \frac{\partial \rho_A}{\partial t}, & f_2 &= \left(\frac{\partial}{\partial x} - \sqrt{\frac{k}{D}} \right) \rho_A \\ e_1 &= \rho_A, & e_2 &= S f_2 = D f_2 \end{aligned}$$

En suivant les notations (5.2.1)(5.2.2) il vient :

$$P_1 = -v, \quad G_1 = 1, \quad P_0 = 0, \quad G_0 = \sqrt{\frac{k}{D}} \quad (5.3.3)$$

La matrice symétrique Q est non singulière et s'écrit :

$$\tilde{P} = \begin{pmatrix} -v & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = Q \quad (5.3.4)$$

A partir de la définition (5.2.12), nous explicitons les variables de port à la frontière :

$$\begin{pmatrix} f_{e,\partial} \\ e_{e,\partial} \end{pmatrix} = R_{ext} \begin{pmatrix} v\rho_A(b) \\ D\frac{\partial\rho_A}{\partial x}(b) - \sqrt{Dk}\rho_A(b) \\ v\rho_A(a) \\ D\frac{\partial\rho_A}{\partial x}(a) - \sqrt{Dk}\rho_A(a) \end{pmatrix} \quad (5.3.5)$$

avec

$$R_{ext} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (5.3.6)$$

Soit :

$$\begin{pmatrix} f_{e,\partial} \\ e_{e,\partial} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} v(\rho_A(a) - \rho_A(b)) + D(\frac{\partial\rho_A}{\partial x}(b) - \frac{\partial\rho_A}{\partial x}(a)) + \sqrt{kD}(\rho_A(a) - \rho_A(b)) \\ v(\rho_A(b) - \rho_A(a)) \\ v(\rho_A(b) + \rho_A(a)) \\ D(\frac{\partial\rho_A}{\partial x}(a) + \frac{\partial\rho_A}{\partial x}(b)) - \sqrt{kD}(\rho_A(a) + \rho_A(b)) \end{pmatrix} \quad (5.3.7)$$

Nous choisissons comme conditions limites les conditions de Danckwerts [28] [73] qui consistent à imposer le flux d'entrée du réacteur $v\rho_A - D\frac{\partial\rho_A}{\partial x}$ et à imposer un gradient de flux en sortie égal à zéro, ce qui se traduit en terme de variables d'entrée par :

$$u = \begin{pmatrix} v\rho_A(a) - D\frac{\partial\rho_A}{\partial x}(a) \\ D\frac{\partial\rho_A}{\partial x}(b) \end{pmatrix} \quad (5.3.8)$$

En utilisant la relation $u = W \begin{pmatrix} f_{e,\partial} \\ e_{e,\partial} \end{pmatrix}$, on peut déduire que :

$$W = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & \frac{\sqrt{kD}}{v} & 1 - \frac{\sqrt{kD}}{v} & -1 \\ 1 & 1 + \frac{\sqrt{kD}}{v} & \frac{\sqrt{kD}}{v} & 1 \end{pmatrix} \quad (5.3.9)$$

Pour que le système soit bien posé, il faut satisfaire la condition $W\Sigma W^T \geq 0$, soit :

$$W\Sigma W^T = \begin{pmatrix} 2 - 4\frac{\sqrt{kD}}{v} & 0 \\ 0 & 2 + 4\frac{\sqrt{kD}}{v} \end{pmatrix} \geq 0 \quad (5.3.10)$$

Ce qui revient à assurer que :

$$2 - 4 \frac{\sqrt{kD}}{v} \geq 0$$

soit

$$4kD \geq v^2$$

Nous concluons donc que sous la condition (5.3.11) le système (5.3.1) contrôlé à la frontière à l'aide des variables de bord (5.3.8) définit un système de commande frontière.

Remarque 5.1. *L'analyse d'existence de solution repose sur le fait que les opérateurs différentiels impliqués soient linéaires et ne dépendent pas de la variable d'espace. Dans le cas présent cette condition n'est remplie que parce que les paramètres sont choisis constants et ne dépendant pas de la variable d'espace, ce qui n'est habituellement pas le cas.*

5.3.2 Cas B : Opérateurs différentiels canoniques

Nous écrivons maintenant notre système sous forme $\mathcal{J}_1 - \mathcal{G}_1 S_1 \mathcal{G}_1^*$. Dans ce cas les opérateurs \mathcal{J} , \mathcal{G}_1 et \mathcal{G}_1^* sont choisis indépendants des paramètres du système et donc indépendants des variables d'espace. La formulation canonique est donnée par :

$$\mathcal{G}_1 = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix}, \mathcal{G}_1^* = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix}, S_1 = \begin{pmatrix} k & 0 \\ -v & D \end{pmatrix} \quad (5.3.11)$$

Le système étendu est donc défini par :

$$\begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -\frac{\partial}{\partial x} \\ -1 & 0 & 0 \\ -\frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{pmatrix} \quad (5.3.12)$$

Avec la relation constitutive linéaire suivante :

$$\begin{pmatrix} e_2 \\ e_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k & 0 \\ -v & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_2 \\ f_3 \end{pmatrix} \quad (5.3.13)$$

Avec

$$\begin{aligned} f_1 &= \frac{\partial \rho_A}{\partial t}, & f_2 &= -e_1, & f_3 &= -\frac{\partial e_1}{\partial x} \\ e_1 &= \rho_A, & e_2 &= -ke_1, & e_3 &= v\rho_A - D\frac{\partial \rho_A}{\partial x} \end{aligned}$$

Nous allons maintenant nous intéresser à la positivité de S . Pour cela nous décomposons l'opérateur S en une partie antisymétrique $S_a = \frac{1}{2} \frac{(S-S^*)}{2}$ et partie symétrique $S_s = \frac{1}{2} \frac{(S+S^*)}{2}$.

Ainsi il suffit de démontrer que la partie symétrique de l'opérateur S_1 est définie positive. Nous calculons $S_a = \frac{1}{2}(S_1 + S_1^*)$ c'est à dire :

$$S_a = \begin{pmatrix} k & -\frac{1}{2}v \\ -\frac{1}{2}v & D \end{pmatrix} \quad (5.3.14)$$

La matrice S_a est définie non négative si toutes les valeurs propres sont positives ou nulles. Calculons ces valeurs propres ; elles sont solution de l'équation :

$$(2k - \lambda)(2D - \lambda) - v^2 = 0 \quad (5.3.15)$$

Pour que les solutions soient définies positives, il faut donc que :

1. $k + D > 0$
2. $4kD - v^2 \geq 0$

Les paramètres étant tous positifs, la première condition est satisfaite. La seconde condition correspond à la condition établie dans le Cas A. Une fois cette condition satisfaite, il est possible de définir les variables de port à la frontière en appliquant la paramétrisation de la section 5.2. Pour cela nous définissons. :

$$P_1 = 0, \quad G_1 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad P_0 = 0, \quad G_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.3.16)$$

et en déduisons la matrice symétrique non singulière \tilde{Q}

$$\tilde{Q} = \tilde{P} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.3.17)$$

La matrice \tilde{P} n'est pas de rang plein, il est donc nécessaire de faire une projection. Les variables de port sont définies par :

$$\begin{pmatrix} f_{e,\partial} \\ e_{e,\partial} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \tilde{Q}_1 & -\tilde{Q}_1 \\ I & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{\tilde{Q}} & 0 \\ 0 & M_{\tilde{Q}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_b \\ e_a \end{pmatrix} \quad (5.3.18)$$

$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ est une base d'image de \tilde{P} et à l'aide des relations $\tilde{Q}_1 = M^T \tilde{Q} M$, $M_{\tilde{Q}} = (M^T M)^{-1} M^T$, nous obtenons :

$$\tilde{Q}_1 = M^T \tilde{Q} M = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.3.19)$$

et :

$$M_{\tilde{Q}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (5.3.20)$$

A partir de l'équation (5.3.18) , nous obtenons les variables de port à la frontière :

$$\begin{pmatrix} f_{e,\partial} \\ e_{e,\partial} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_A(b) \\ -k\rho_A(b) \\ v\rho_A(b) - D\frac{\partial\rho_A}{\partial x}(b) \\ \rho_A(a) \\ -k\rho_A(a) \\ v\rho_A(a) - D\frac{\partial\rho_A}{\partial x}(a) \end{pmatrix} \quad (5.3.21)$$

Soit :

$$\begin{pmatrix} f_{e,\partial} \\ e_{e,\partial} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} D\frac{\partial\rho_A}{\partial x}(b) - v\rho_A(b) + v\rho_A(a) - D\frac{\partial\rho_A}{\partial x}(a) \\ -\rho_A(b) + \rho_A(a) \\ \rho_A(b) + \rho_A(a) \\ -D\frac{\partial\rho_A}{\partial x}(b) + v\rho_A(b) + v\rho_A(a) - D\frac{\partial\rho_A}{\partial x}(a) \end{pmatrix} \quad (5.3.22)$$

Comme pour le cas non canonique, nous choisissons les conditions de Danckwerts [28] [73] comme une combinaison linéaire des variables de port aux frontières, soit :

$$u = \begin{pmatrix} v\rho_A(a) - D\frac{\partial\rho_A}{\partial x}(a) \\ D\frac{\partial\rho_A}{\partial x}(b) \end{pmatrix} = W \begin{pmatrix} f_{e,\partial} \\ e_{e,\partial} \end{pmatrix} \quad (5.3.23)$$

Nous en déduisons que :

$$W = \sqrt{2} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{v}{2} & \frac{v}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (5.3.24)$$

et

$$W\Sigma W^T = 2 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & v \end{pmatrix} \geq 0 \quad (5.3.25)$$

Nous concluons que, si la condition (5.3.11) est satisfaite, induisant la coercivité de S, le système (5.3.1) avec les variables de commande à la frontière définies par (5.3.23) définit un système commandé à la frontière.

5.4 Représentation linéarisée

Dans cette section, nous considérons le réacteur tubulaire non isotherme en vision entropique défini dans le Chapitre (1) linéarisé autour d'un profil d'équilibre $(T_d, \rho_{A_d}, \rho_{B_d})$. Les variables intensives $w^T = (\frac{1}{T}, -\frac{\mu_A}{T}, -\frac{\mu_B}{T})$ sont considérées comme étant les variables d'effort.

Le modèle du réacteur tubulaire linéarisé est donnée sous la forme matricielle suivante (cf Annexe .2) :

$$\frac{dz}{dt} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(\alpha \begin{pmatrix} \omega_1 \\ \omega_2 \\ \omega_3 \end{pmatrix} - \beta \begin{pmatrix} \frac{\partial\omega_1}{\partial x} \\ \frac{\partial\omega_2}{\partial x} \\ \frac{\partial\omega_3}{\partial x} \end{pmatrix} \right) + \alpha_R \begin{pmatrix} \omega_1 \\ \omega_2 \\ \omega_3 \end{pmatrix} \quad (5.4.1)$$

où z est le vecteur des variables d'état $(h, \rho_A, \rho_B)^T$ et les matrices,

$$\alpha = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3 \\ \alpha_4 & \alpha_5 & 0 \\ \alpha_6 & 0 & \alpha_7 \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 \\ \beta_2 & \beta_4 & 0 \\ \beta_3 & 0 & \beta_5 \end{pmatrix} \quad \alpha_R = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \alpha_{R_1} & \alpha_{R_2} & 0 \\ -\alpha_{R_1} & -\alpha_{R_2} & 0 \end{pmatrix} \quad (5.4.2)$$

étant définies suite à la linéarisation du système et explicitées dans la Table 1 en annexe.

Il est important de noter que les matrices α, β, α_R sont des matrices dépendant de variable d'espace x .

5.5 Existence de solutions pour le modèle linéarisé

Nous écrivons notre système sous forme $\mathcal{J}_1 - \mathcal{G}_1 S_1 \mathcal{G}_1^*$ en considérant $\mathcal{J}_1 = 0$. Dans notre cas on considère :

$$\mathcal{G}_1 = \begin{pmatrix} I_3 & -I_3 \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix}, \mathcal{G}_1^* = \begin{pmatrix} I_3 \\ I_3 \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix}, S_1 = \begin{pmatrix} \alpha_R & 0_3 \\ -\alpha & \beta \end{pmatrix} \quad (5.5.1)$$

C'est à dire on étend le système de la manière suivante :

$$\begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & I_3 & -I_3 \frac{\partial}{\partial x} \\ -I_3 & 0_3 & 0_3 \\ -I_3 \frac{\partial}{\partial x} & 0_3 & 0_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{pmatrix} \quad (5.5.2)$$

où $0_3, I_3 \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ Avec

$$\begin{aligned} f_1 &= \frac{\partial z}{\partial t} \\ f_2 &= -e_1 \\ f_3 &= -\frac{\partial e_1}{\partial x} \\ e_1 &= \omega \\ e_2 &= \alpha_R w \\ e_3 &= \alpha \omega - \beta \frac{\partial \omega}{\partial x} \end{aligned}$$

Il reste à démontrer que $S_1 + S_1^*$ est semi définie non négative. $S_1 + S_1^*$ est définie par :

$$S_1 + S_1^* = \begin{pmatrix} \alpha_R + \alpha_R^T & -\alpha^T \\ -\alpha & \beta + \beta^T \end{pmatrix} \quad (5.5.3)$$

Pour cela il suffit que pour tout x la condition $S(x) + S(x)^* \geq 0$ soit satisfaite. Étant donnée la complexité de l'expression de α et β comme fonction des paramètres physiques du système (couplages et linéarisation), il est malheureusement impossible de déduire de ces contraintes des conditions sur les paramètres physiques du système. Il est cependant possible de vérifier

numériquement que cette condition est satisfaite pour un jeu de paramètres donné. Un fois cette condition satisfaite nous pouvons définir les variables de port à la frontière utilisables pour la commande. On utilise pour cela la paramétrisation issue des notations (5.2.1)(5.2.2), soit :

$$P_1 = 0, \quad G_1 = \begin{pmatrix} 0_3 & -I_3 \end{pmatrix}, \quad P_0 = 0_3, \quad G_0 = \begin{pmatrix} I_3 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.5.4)$$

Ce qui permet de définir :

$$\tilde{P} = \begin{pmatrix} 0_3 & 0_3 & -I_3 \\ 0_3 & 0_3 & 0_3 \\ -I_3 & 0_3 & 0_3 \end{pmatrix} \quad (5.5.5)$$

La matrice \tilde{P} n'est pas de rang plein, les variables de port sont donc définies par :

$$\begin{pmatrix} f_{f,\partial} \\ f_{e,\partial} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \tilde{Q}_1 & -\tilde{Q}_1 \\ I & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{\tilde{Q}} & 0 \\ 0 & M_{\tilde{Q}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_b \\ e_a \end{pmatrix} \quad (5.5.6)$$

où $\tilde{Q}_1 = M^T \tilde{Q} M$, $M_{\tilde{Q}} = (M^T M)^{-1} M^T$ avec $M = \begin{pmatrix} 0_3 & I_3 \\ 0_3 & 0_3 \\ I_3 & 0_3 \end{pmatrix}$ qui est une base d'image de \tilde{P} , soit :

$$\tilde{Q}_1 = M^T \tilde{Q} M = \begin{pmatrix} 0_3 & -I_3 \\ -I_3 & 0_3 \end{pmatrix} \quad (5.5.7)$$

et

$$M_{\tilde{Q}} = \begin{pmatrix} 0_3 & 0_3 & I_3 \\ I_3 & 0_3 & 0_3 \end{pmatrix} \quad (5.5.8)$$

A partir de la définition (5.5.6), nous obtenons donc comme variables de port à la frontière :

$$\begin{pmatrix} f_{f,\partial} \\ f_{e,\partial} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -I_3 & 0_3 & 0_3 & I_3 & 0_3 & 0_3 \\ 0_3 & 0_3 & -I_3 & 0_3 & 0_3 & I_3 \\ 0_3 & 0_3 & I_3 & 0_3 & 0_3 & I_3 \\ I_3 & 0_3 & 0_3 & I_3 & 0_3 & 0_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w(b) \\ \alpha_R w(b) \\ \alpha w(b) - \beta \frac{\partial w}{\partial x}(b) \\ w(a) \\ \alpha_R w(a) \\ \alpha w(a) - \beta \frac{\partial w}{\partial x}(a) \end{pmatrix} \quad (5.5.9)$$

ou encore :

$$\begin{pmatrix} f_{f,\partial} \\ f_{e,\partial} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -w(b) + w(a) \\ \beta \frac{\partial w}{\partial x}(b) - \alpha w(b) + \alpha w(a) - \beta \frac{\partial w}{\partial x}(a) \\ -\beta \frac{\partial w}{\partial x}(b) + \alpha w(b) + \alpha w(a) - \beta \frac{\partial w}{\partial x}(a) \\ w(b) + w(a) \end{pmatrix} \quad (5.5.10)$$

En choisissant comme dans la section précédente des conditions frontières conformes aux conditions de Danckwerts (qui consistent à imposer le flux d'entrée du réacteur $\alpha w - \beta \frac{\partial w}{\partial x}$ et à imposer un gradient de flux en sortie égal à zéro), il vient :

$$\begin{cases} u_{in} &= \alpha w(a) - \beta \frac{\partial w}{\partial x}(a) \\ 0 &= \beta \frac{\partial w}{\partial x}(b) \end{cases}$$

En utilisant la notation $u = W \begin{pmatrix} f_{f,\partial} \\ f_{e,\partial} \end{pmatrix}$, cela revient à définir :

$$W = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0_3 & \frac{1}{2}I_3 & \frac{1}{2}I_3 & 0_3 \\ -\frac{\alpha}{2} & \frac{1}{2}I_3 & -\frac{1}{2}I_3 & \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} \quad (5.5.11)$$

et donc

$$W\Sigma W^T = 2 \begin{pmatrix} 0_3 & 0_3 \\ 0_3 & \alpha \end{pmatrix} \quad (5.5.12)$$

La condition suffisante d'existence de solutions est donc associée à la positivité de α et de $S + S^*$ soit :

$$\begin{pmatrix} \alpha_R + \alpha_R^T & -\alpha \\ -\alpha & \beta + \beta^T \end{pmatrix} \geq 0, \quad \alpha \geq 0$$

Dans des cas simplifiés ces deux conditions peuvent être vérifiées algébriquement mais elles nécessitent dans le cas général une validation numérique.

5.6 Conclusion et perspectives

Dans ce chapitre nous avons proposé une étude préliminaire d'existence de solutions pour les réacteurs tubulaires commandés à la frontière. Dans un premier temps nous nous sommes intéressé au réacteur tubulaire isotherme modélisé sous forme hamiltonienne avec dissipation. La paramétrisation des conditions frontière pour ce système linéaire permet de montrer que sous certaines conditions, la solution de l'EDP associée existe et satisfait certaines propriétés de contraction. Ces conditions peuvent être dérivées dans le cas où les paramètres dépendent des variables de l'espace en utilisant une paramétrisation canonique. C'est cette paramétrisation que nous avons utilisée pour le système complet linéarisé. On montre que l'existence de solution est dans ce cas associée à une condition de positivité matricielle qui ne peut dans le cas général être vérifiée que numériquement. L'étude de la positivité en fonction de la valeur des paramètres physiques reste un problème ouvert.

Chapitre 6

Conclusion

6.1 Conclusion générale

Cette thèse porte sur les sujets de la représentation et de la commande stabilisante des réacteurs tubulaires monophasiques à l'aide des propriétés issues de la thermodynamique irréversible. C'est donc un sujet pluridisciplinaire liant automatique, thermodynamique et génie des procédés.

Dans le premier chapitre nous proposons deux représentations du modèle de réacteur tubulaire :

- une première basée sur la représentation implicite de l'énergie interne ;
- une seconde basée sur la représentation implicite de l'entropie. Cette seconde approche correspond à l'approche utilisée en génie des procédés.

Ces deux approches basées sur l'équation de Gibbs font apparaître des couples de variables conjuguées dont le produit donne une énergie ou une entropie respectivement. Cette structure particulière n'est en général pas utilisée en génie des procédés. Elle est très utilisée dans la modélisation Bond graph des systèmes ou plus généralement dans la représentation hamiltonienne à port.

Nous avons aussi discuté le modèle d'interface aux frontières en entropie afin de déterminer la production irréversible d'entropie due aux échanges du système avec son environnement extérieur, c'est-à-dire aux frontières du réacteur.

Dans le second chapitre nous avons défini à partir de la représentation entropique deux fonctions thermodynamiques, la disponibilité A et la disponibilité réduite A_r qui sont des fonctions définies positives et semi-définies positives respectivement. La positivité de ces fonctions découle de la concavité de l'entropie. Nous avons discuté des propriétés de ces fonctions et en particulier de leur propriété de convexité ainsi que du sous espace sur lequel elles s'annulent.

Dans le troisième chapitre nous avons utilisé ces deux fonctions pour synthétiser cinq lois de commande stabilisantes distribuées du modèle du réacteur tubulaire vers un profil d'équilibre en utilisant la température de la double enveloppe comme variable de commande. Les

deux premières lois imposent respectivement à la dérivée temporelle de la disponibilité d'être égale à un terme quadratique en l'état défini négatif et à l'opposé de la disponibilité. Nous avons effectué des simulations de ces lois de commande. Les lois de commande stabilisantes construites à partir de la disponibilité thermodynamique fonctionnent bien au prix de très hautes températures de la double enveloppe. L'utilisation de la fonction de disponibilité réduite lève cet inconvénient au prix d'une hypothèse supplémentaire sur les profils stationnaires du modèle afin d'assurer la stabilité asymptotique. Les simulations montrent l'efficacité de ces stratégies de commande même en présence de perturbation. Nous avons aussi proposé une loi de commande pratique où la variable de commande est uniforme dans l'espace en utilisant la disponibilité réduite. Cette commande stabilise asymptotiquement et globalement le réacteur tubulaire vers le profil d'équilibre désiré.

Dans le quatrième chapitre, nous revenons sur la représentation du réacteur tubulaire et nous proposons une représentation hamiltonienne et une pseudo hamiltonienne en vision entropique et énergétique dans le cas du modèle de réaction-diffusion. Ces deux représentations peuvent être utilisées pour la réduction spatiale ou la synthèse de commande.

Enfin nous terminons sur une discussion relative à l'analyse d'existence de solution dans des réacteurs commandés à la frontière. Nous discutons des différentes paramétrisations de l'opérateur différentiel qui décrit le modèle. De ces paramétrisations nous avons dérivé les variables de port à la frontière qui assure l'existence des solutions. Cette première étude est d'un intérêt particulier pour le cas de l'étude d'un linéarisé du réacteur tubulaire avec les lois non linéaires.

6.2 Perspective

Le problème de commande des réacteurs tubulaires en utilisant des fonctions thermodynamiques est un problème complexe, en particulier en ce qui concerne le contrôle frontière que nous souhaitons approfondir. Le problème de commande peut aussi être abordé par le biais des méthodes basées sur la passivité des systèmes hamiltoniens à port. Dans cette thèse nous avons proposé une représentation hamiltonienne à port d'un système réaction diffusion. La prise en compte de la convection dans un cadre très général semble difficile mais dans le cas traité dans cette thèse, avec une vitesse de convection constante et uniforme, le problème semble plus facile car l'équation de Gibbs en dimension infinie se ramène à une équation plus simple. Dans la thèse nous avons considéré des variables d'effort et de flux thermodynamique. Cependant, la convection est un phénomène mécanique. Il serait donc intéressant de prendre en compte la convection en considérant le bilan de quantité de mouvement.

Enfin, du point de vue numérique, nous avons utilisé un modèle discrétisé par une méthode de différences finies, qui perd la structure originelle du système. La réduction spatiale géométrique par une méthode par éléments finis mixtes structurés [64][65][41][16][41] pourra être utilisée afin d'envisager la synthèse de lois de commande basées sur la passivité.

Bibliographie

- [1] O.M. Agudelo, J.J. Espinosa, and B. De Moor. Pod-based predictive controller with temperature constraints for a tubular reactor. In *Decision and Control, 2007 46th IEEE Conference on*, pages 3537–3542. IEEE, 2007.
- [2] R. Aguilar, A. Poznyak, R. Martinez-Guerra, and R. Maya-Yescas. Temperature control in catalytic cracking reactors via a robust pid controller. *Journal of Process Control*, 12(6) :695–705, 2002.
- [3] I. Aksikas, A. Fuxman, J.F. Forbes, and J.J. Winkin. LQ control design of a class of hyperbolic pde systems : Application to fixed-bed reactor. *Automatica*, 45(6) :1542–1548, 2009.
- [4] I. Aksikas, J.J. Winkin, and D. Dochain. Optimal LQ-feedback regulation of a nonisothermal plug flow reactor model by spectral factorization. *Automatic Control, IEEE Transactions on*, 52(7) :1179–1193, 2007.
- [5] A.A. Alonso and B.E. Ydstie. Process systems, passivity and the second law of thermodynamics. *Computers & chemical engineering*, 20 :S1119–S1124, 1996.
- [6] A.A. Alonso and B.E. Ydstie. Stabilization of distributed systems using irreversible thermodynamics. *Automatica*, 37(11) :1739–1755, 2001.
- [7] A.A. Alonso, B.E. Ydstie, and J.R. Banga. From irreversible thermodynamics to a robust control theory for distributed process systems. *Journal of Process Control*, 12(4) :507–517, 2002.
- [8] A. Alvarez-Ramirez, J. and Morales. PI control of continuously stirred tank reactors : stability and performance. *Chemical Engineering Science*, 55(22) :5497–5507, 2000.
- [9] J. Alvarez-Ramirez and R. Femat. Robust PI stabilization of a class of chemical reactors. *Systems & Control Letters*, 38(4-5) :219–225, 1999.
- [10] J. Alvarez-Ramirez and H. Puebla. On classical PI control of chemical reactors. *Chemical Engineering Science*, 56 :2111–2121, 2001.

- [11] R. Antonelli and A. Astolfi. Continuous stirred tank reactors : easy to stabilise? *Automatica*, 39(10) :1817–1827, 2003.
- [12] C. Antoniadès and P.D. Christofides. Studies on nonlinear dynamics and control of a tubular reactor with recycle. *Nonlinear Analysis : Theory, Methods & Applications*, 47(9) :5933–5944, 2001.
- [13] R. Aris and N.R. Amundson. An analysis of chemical reactor stability and control - I : The possibility of local control, with perfect or imperfect control mechanisms. *Chemical Engineering Science*, 7(3) :121–131, 1958.
- [14] A. Armaou and P.D. Christofides. Nonlinear feedback control of parabolic partial differential equation systems with time-dependent spatial domains. *Journal of mathematical analysis and applications*, 239(1) :124–157, 1999.
- [15] A. Baaiu, F. Couenne, D. Eberard, C. Jallut, L. Lefèvre, Y. Legorrec, and B.M. Maschke. Port-based modelling of mass transport phenomena. *Mathematical and Computer Modelling of Dynamical Systems*, 15(3) :233–254, 2009.
- [16] A. Baaiu, F. Couenne, L. Lefèvre, Y. Legorrec, and M. Tayakout. Structure-preserving infinite dimensional model reduction : Application to adsorption processes. *Journal of Process Control*, 19(3) :394–404, 2009.
- [17] S. Bahroun. *Modélisation et approche thermodynamique pour la commande des réacteurs chimiques catalytiques triphasiques continus et discontinus*. PhD thesis, Université Claude Bernard Lyon 1, 2012.
- [18] M.J. Balas. Finite-dimensional control of distributed parameter systems by galerkin approximation of infinite dimensional controllers. *Journal of mathematical analysis and applications*, 114(1) :17–36, 1986.
- [19] N. Beniich, A. El Bouhtouri, and D. Dochain. Global input constrained adaptive lambda-tracking with application to a nonlinear distributed parameter exothermic chemical reaction models in tubular reactor. *International Journal of Tomography & Statistics*, 6(S07) :80–85, 2007.
- [20] N. Beniich, A. El Bouhtouri, and D. Dochain. Input constrained adaptive tracking for a nonlinear distributed parameter tubular reactor. *International Journal of Adaptive Control and Signal Processing*, 24(1) :249–260, 2010.
- [21] R.B. Bird, W.E. Stewart, and E.N. Lightfoot. *Transport phenomena*. John Wiley & Sons, 2007.

- [22] K. Bizon, G. Continillo, L. Russo, and J. Smuła. On pod reduced models of tubular reactor with periodic regimes. *Computers & Chemical Engineering*, 32(6) :1305–1315, 2008.
- [23] D.M. Bošković and M. Krstić. Backstepping control of chemical tubular reactors. *Computers & chemical engineering*, 26(7) :1077–1085, 2002.
- [24] H.B. Callen. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. John Wiley & Sons, 2006.
- [25] P.D. Christofides. *Nonlinear and robust control of PDE systems : Methods and applications to transport-reaction processes*. Springer, 2001.
- [26] T.J. Courant. Dirac manifolds. *Transactions of the American Mathematical Society*, 319(2) :631–661, 1990.
- [27] R.F. Curtain. Pole assignment for distributed systems by finite-dimensional control. *Automatica*, 21(1) :57–67, 1985.
- [28] P.V. Danckwerts. Continuous flow systems : distribution of residence times. *Chemical Engineering Science*, 2(1) :1–13, 1953.
- [29] S.R. De Groot and P. Mazur. *Non-equilibrium thermodynamics*. Courier Dover Publications, 2013.
- [30] J.E. Dennis Jr and R.B. Schnabel. *Numerical methods for unconstrained optimization and nonlinear equations*, volume 16. Siam, 1996.
- [31] I.Y. Dorfman. *Dirac structures and integrability of nonlinear evolution equations*. Manchester University Press, 1990.
- [32] V. Duindam, A. Macchelli, S. Stramigioli, and editors Bruyninckx, H. *Modeling and Control of Complex Physical Systems - The Port-Hamiltonian Approach*. Springer, Sept. 2009. ISBN 978-3-642-03195-3.
- [33] N.H. El-Farra, A. Armaou, and P.D. Christofides. Analysis and control of parabolic pde systems with input constraints. *Automatica*, 39(4) :715–725, 2003.
- [34] N.H. El-Farra and P.D. Christofides. Coordinating feedback and switching for control of spatially distributed processes. *Computers & chemical engineering*, 28(1) :111–128, 2004.
- [35] D.J. Evans and G.P. Morriss. *Statistical mechanics of nonequilibrium liquids*. Anu E Press, 2007.
- [36] C.A. Farschman, K.P. Viswanath, and B.E. Ydstie. Process systems and inventory control. *AIChE Journal*, 44(8) :1841–1857, 1998.

- [37] A. Favache and D. Dochain. Power-shaping control of reaction systems : The CSTR case. *Automatica*, 46(11) :1877–1883, 2010.
- [38] E. Garcia-Canseco and R. Ortega. A new passivity property of linear rlc circuits with application to power shaping stabilization. In *American Control Conference, 2004. Proceedings of the 2004*, volume 2, pages 1428–1433. IEEE, 2004.
- [39] C. Georgakis, R. Aris, and N.R. Amundson. Studies in the control of tubular reactors-I general considerations. parts I-III. *Chemical Engineering Science*, 32(11) :1359–1387, 1977.
- [40] P. Glansdorf and I. Prigogine. Structure, stability and fluctuations. *Interscience, New York*, 1971.
- [41] B. Hamroun, L. Lefèvre, and E. Mendes. Port-based modelling and geometric reduction for open channel irrigation systems. In *Decision and Control, 2007 46th IEEE Conference on*, pages 1578–1583. IEEE, 2007.
- [42] V. Hlavacek and H. Hofmann. Modeling of chemical reactors XVI steady state axial heat and mass transfer in tubular reactors an analysis of the uniqueness of solutions. *Chemical Engineering Science*, 25(1) :173–185, 1970.
- [43] V. Hlavacek and H. Hofmann. Modeling of chemical reactors XVII steady state axial heat and mass transfer in tubular reactors numerical investigation of multiplicity. *Chemical Engineering Science*, 25(1) :187–199, 1970.
- [44] H. Hoang. *Approche thermodynamique pour la stabilisation des réacteurs chimiques*. PhD thesis, Université Claude Bernard Lyon 1, 2009.
- [45] H. Hoang, F. Couenne, C. Jallut, and Y. Le Gorrec. The port hamiltonian approach to modeling and control of continuous stirred tank reactors. *Journal of Process Control*, 21(10) :1449–1458, 2011.
- [46] H. Hoang, F. Couenne, C. Jallut, and Y. Le Gorrec. Lyapunov-based control of non isothermal continuous stirred tank reactors using irreversible thermodynamics. *Journal of Process Control*, 22(2) :412–422, 2012.
- [47] H. Hoang, F. Couenne, C. Jallut, and Y. Le Gorrec. Lyapunov-based control of non isothermal continuous stirred tank reactors using irreversible thermodynamics. *Journal of Process Control*, 22(2) :412–422, 2012.
- [48] H. Hoang and D. Dochain. A thermodynamic approach to the passive boundary control of tubular reactors nonlinear control systems. In *9th IFAC Symposium on Nonlinear Control Systems, Toulouse, France, September 4-6*, volume 9, pages 383–388, 2013.

- [49] N. Hudon, M. Guay, M. Perrier, and D. Dochain. Adaptive extremum-seeking control of convection-reaction distributed reactor with limited actuation. *Computers & Chemical Engineering*, 32(12) :2994–3001, 2008.
- [50] N. Hudon, M. Perrier, M. Guay, and D. Dochain. Adaptive extremum seeking control of a non-isothermal tubular reactor with unknown kinetics. *Computers & chemical engineering*, 29(4) :839–849, 2005.
- [51] A.K. Jana, A.N. Samanta, and S. Ganguly. Globally linearized control on diabatic continuous stirred tank reactor : a case study. *ISA transactions*, 44(3) :423–444, 2005.
- [52] K.R. Jillson and B.E. Ydstie. Process networks with decentralized inventory and flow control. *Journal of Process Control*, 17(5) :399–413, 2007.
- [53] J. Kestin. Availability : the concept and associated terminology. *Energy*, 5(8) :679–692, 1980.
- [54] H.K. Khalil and J.W. Grizzle. *Nonlinear systems*, volume 3. Prentice hall Upper Saddle River, 2002.
- [55] M. Kurula and H. Zwart. Proving existence of solutions of pdes using feedback theory. In *20th International Symposium on Mathematical Theory of Networks and Systems*. MTNS2012, 2012.
- [56] M. Kurula and H. Zwart. Feedback theory extended for proving generation of contraction semigroups, 2014. arXiv :1403.3564.
- [57] L. Lao, M. Ellis, and P.D. Christofides. Economic model predictive control of transport-reaction processes. *IECR*, 53(18) :7382–7396, 2014.
- [58] Y. Le Gorrec, J.A. Villegas, H Zwart, and B. Maschke. Dissipative boundary control systems with application to distributed parameters reactors. In *Joint CCA, ISIC and CACSD 2006, October 4-6, 2006, Munich, Germany*, 2006.
- [59] Y. Le Gorrec, H. Zwart, and B.M. Maschke. Dirac structures and boundary control systems associated with skew-symmetric differential operators. *SIAM journal on control and optimization*, 44(5) :1864–1892, 2005.
- [60] L. Lefèvre, D. Dochain, S.F. De Azevedo, and A. Magnus. Optimal selection of orthogonal polynomials applied to the integration of chemical reactor equations by collocation methods. *Computers & Chemical Engineering*, 24(12) :2571–2588, 2000.
- [61] L. Liu, B. Huang, and S. Djuljevic. Model predictive control of axial dispersion chemical reactor. *Journal of Process Control*, 24(11) :1671–1690, 2014.

- [62] A. Macchelli and C. Melchiorri. Modeling and control of the timoshenko beam. the distributed port hamiltonian approach. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 43(2) :743–767, 2004.
- [63] T. Meurer and A. Kugi. Tracking control for boundary controlled parabolic PDEs with varying parameters : Combining backstepping and differential flatness. *Automatica*, 45(5) :1182–1194, 2009.
- [64] R. Moulla, L. Lefèvre, and B.M. Maschke. Geometric pseudospectral method for spatial integration of dynamical systems. *Mathematical and Computer Modelling of Dynamical Systems*, 17(1) :85–104, 2011.
- [65] R. Moulla, L. Lefèvre, and B.M. Maschke. Pseudo-spectral methods for the spatial symplectic reduction of open systems of conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 231(4) :1272–1292, 2012.
- [66] Y. Orlov and D. Dochain. Discontinuous feedback stabilization of minimum-phase semilinear infinite-dimensional systems with application to chemical tubular reactor. *Automatic Control, IEEE Transactions on*, 47(8) :1293–1304, 2002.
- [67] H. Ramirez. *Control of irreversible thermodynamic processes using port-Hamiltonian systems defined on pseudo-Poisson and contact structures*. PhD thesis, Université Claude Bernard Lyon 1, 2012.
- [68] H. Ramírez, B. Maschke, and D. Sbarbaro. Irreversible port-hamiltonian systems : A general formulation of irreversible processes with application to the CSTR. *Chemical Engineering Science*, 89 :223–234, 2013.
- [69] H. Ramírez, D. Sbarbaro, and R. Ortega. On the control of non-linear processes : An ida-pbc approach. *Journal of Process Control*, 19(3) :405–414, 2009.
- [70] M. Ruszkowski, V. Garcia-Osorio, and B.E. Ydstie. Passivity based control of transport reaction systems. *AIChE Journal*, 51(12) :3147–3166, 2005.
- [71] S. Sakai and S. Stramigioli. Port-hamiltonian approaches to motion generation for mechanical systems. In *Robotics and Automation, 2007 IEEE International Conference on*, pages 1948–1953. IEEE, 2007.
- [72] S.I. Sandler. *Chemical, biochemical, and engineering thermodynamics*, volume 4. John Wiley & Sons Hoboken, NJ, 2006.
- [73] G. Standart. The thermodynamic significance of the danckwerts’ boundary conditions. *Chemical Engineering Science*, 23(6) :645–655, 1968.

- [74] M. Struwe. *Variational Methods : Applications to Nonlinear Partial Differential Equations and Hamiltonian Systems, Third Edition*. Springer, 2000.
- [75] M.V. Sussman. Steady-flow availability and the standard chemical availability. *Energy*, 5(8) :793–802, 1980.
- [76] J.M. Tarbell. A thermodynamic liapunov fncion for the near equilibrium CSTR. *Chemical Engineering Science*, 32 :1471–1476, 1977.
- [77] G. Taylor. Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly through a tube. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 219(1137) :186–203, 1953.
- [78] G. Taylor. Conditions under which dispersion of a solute in a stream of solvent can be used to measure molecular diffusion. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 225(1163) :473–477, 1954.
- [79] R. Taylor and R. Krishna. *Multicomponent Mass Transfer*. John Wiley and sons, New York, 1993.
- [80] A.J. Van der Schaft. L 2-gain analysis of nonlinear systems and nonlinear state-feedback control. *Automatic Control, IEEE Transactions on*, 37(6) :770–784, 1992.
- [81] A.J. Van der Schaft. *L2-gain and passivity in nonlinear control*. Springer-Verlag New York, Inc., 1999.
- [82] A.J. Van der Schaft and B.M. Maschke. Hamiltonian formulation of distributed-parameter systems with boundary energy flow. *Journal of Geometry and Physics*, 42(1) :166–194, 2002.
- [83] A. Varma and R. Aris. Stirred pots and empty tubes, 1977.
- [84] J.A. Villegas. *A port-Hamiltonian approach to distributed parameter systems*. PhD thesis, University of Twente, 2007.
- [85] J. Villermaux. *Génie de la réaction chimique Concept et fonctionnement des réacteurs*. lavoisier, 1985.
- [86] G. Wall. *Exergy-a useful concept within resource accounting*. Chalmers tekniska högskola, Göteborgs universitet, 1977.
- [87] G. Wall and M. Gong. On exergy and sustainable development-part 1 : Conditions and concepts. *Exergy, an International Journal*, 1(3) :128–145, 2001.
- [88] J.C. Willems. Dissipative dynamical systems part i : General theory. *Archive for rational mechanics and analysis*, 45(5) :321–351, 1972.

- [89] J.J. Winkin, D. Dochain, and P. Ligarius. Dynamical analysis of distributed parameter tubular reactors. *Automatica*, 36(3) :349–361, 2000.
- [90] H.N. Wu and B. Luo. L2 disturbance attenuation for highly dissipative nonlinear spatially distributed processes via HJI approach. *Journal of Process Control*, 24(5) :550–567, 2014.
- [91] B.E. Ydstie. Passivity based control via the second law. *Computers & chemical engineering*, 26(7) :1037–1048, 2002.

Annexe

.1 Le modèle du réacteur réaction-diffusion

Nous établissons un modèle en dimension infinie du réacteur réaction-diffusion. Dans ce modèle nous considérons les phénomènes suivants : la réaction, la diffusion et la conduction. Il n'y a pas de phénomène de convection dans ce modèle. Dans l'annexe, nous ne présentons que le modèle dans la représentation entropique.

Les différents bilans pour la modélisation

1. bilans de matière : Le bilan par espèce i (pour $i = A, B$) s'écrit :

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} (F_{dis}^i) + M_i \nu_i^s r \quad (.1.1)$$

2. bilan d'énergie : Le bilan s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) = -\frac{\partial}{\partial x} F_{dis}^h - \frac{\partial}{\partial x} F_{cond}^h + q(x, t) \quad (.1.2)$$

Représentation entropique du réacteur tubulaire

La représentation entropique inclut le bilan d'énergie et les bilans de matière par espèce.

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} = -\frac{\partial F_{conv}^h}{\partial x} - \frac{\partial F_{dis}^h}{\partial x} + q \quad (.1.3)$$

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = -\frac{\partial F_{dis}^A}{\partial x} - \nu_A r \quad (.1.4)$$

$$\frac{\partial \rho_B}{\partial t} = -\frac{\partial F_{dis}^B}{\partial x} + \nu_B r \quad (.1.5)$$

Les conditions aux frontières

Comme on n'a pas de flux de convection au sein du réacteur ni en entrée, nous faisons l'hypothèse que le réacteur est alimenté par transfert de matière et de chaleur. Il n'y a que l'espèce A à l'entrée du réacteur. On alimente le réacteur par les deux cotés, donc le réacteur est symétrique.

En considérant la continuité des différents flux (la masse et l'entropie) aux frontières , on écrit la condition frontière à gauche :

$$\Phi_{0-}^A = \lambda_m(\rho_A|_{0-} - \rho_A|_{0+}) = (F_{dis}^A)|_0 \quad (.1.6)$$

$$\Phi_{0-}^B = \lambda_m(\rho_B|_{0-} - \rho_B|_{0+}) = (F_{dis}^B)|_0 \quad (.1.7)$$

$$\Phi_{tot}^h|_{0-} = \Phi_{0-}^h + \Phi_{0-}^A h_A|_{\bar{*}} + \Phi_{0-}^B h_B|_{*} = (F_{cond} + F_{dis}^h)|_{0+} \quad (.1.8)$$

avec $\Phi_{0-}^h = \lambda_h(T_{0-} - T_{0+})$ où * et $\bar{*}$ dépend du sens du flux matière à $x = 0$. * et $\bar{*}$ représentent 0^+ ou 0^- . Dans notre cas , nous avons des flux d'espèce A qui entre dans le réacteur et le flux d'espèce B qui sort . Ainsi l'équation (.1.8) devient :

$$\Phi_{0-}^h + \Phi_{0-}^A h_A|_{0-} + \Phi_{0-}^B h_B|_{0+} \quad (.1.9)$$

On a la même condition frontière à droite comme le réacteur est symétrique :

$$\Phi_{L+}^A = \lambda_m(\rho_A|_{L+} - \rho_A|_{L-}) = F_{dis}^A|_{L-} \quad (.1.10)$$

$$\Phi_{L+}^B = \lambda_m(\rho_B|_{L+} - \rho_B|_{L-}) = F_{dis}^B|_{L-} \quad (.1.11)$$

$$\Phi_{tot}^h|_{L+} = \Phi_{L+}^h + \Phi_{L+}^A h_A|_{L-} + \Phi_{L+}^B h_B|_{L+} \quad (.1.12)$$

.2 Le modèle linéarisé pour la commande frontière

Le système non-isotherme linéarisé utilisé au chapitre 5 est basé sur le système en vision entropique proposé en chapitre 1. Nous avons linéarisé le système autour d'un profil d'équilibre $\begin{pmatrix} T_d & \theta_{A_d} & \theta_{B_d} \end{pmatrix}$ en considérant les variables intensives $\omega^T = \begin{pmatrix} \omega_1 & \omega_2 & \omega_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{T} & -\frac{\mu_A}{T} & -\frac{\mu_B}{T} \end{pmatrix}$ comme les variables d'état.

Nous linéarisons les lois constitutives terme par terme :

.2.1 Linéarisation du flux de conduction $F_{cond}^h = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}$

Nous notons les variables linéarisées avec une barre ; ainsi nous avons $w = w_d + \epsilon \bar{w}$ Il suffit de linéariser $\frac{\partial T}{\partial x}$ par rapport à $\omega_1 = \frac{1}{T}$:

$$\begin{aligned} \bar{T} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\partial T}{\partial \epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \epsilon} \frac{1}{(\omega_{1_d} + \epsilon \bar{\omega}_1)} \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{-\bar{\omega}_1}{(\omega_{1_d} + \epsilon \bar{\omega}_1)^2} \\ &= \frac{-1}{\omega_{1_d}^2} \bar{\omega}_1 = -T_d^2 \bar{\omega}_1 \end{aligned} \quad (.2.1)$$

Nous avons donc $\frac{\partial \bar{T}}{\partial x} = -\frac{\partial(T_d)^2}{\partial x} \bar{\omega}_1 - T_d^2 \frac{\partial \bar{\omega}_1}{\partial x}$, et le flux de conduction s'écrit :

$$\bar{f}_{cond}^h = \lambda \frac{\partial(T_d)^2}{\partial x} \bar{\omega}_1 + \lambda T_d^2 \frac{\partial \bar{\omega}_1}{\partial x} \quad (.2.2)$$

.2.2 Linéarisation des flux convectifs $F_{conv}^i = \theta_i v$

Pour le terme convectif, il faut linéariser θ_A par rapport aux variables d'efforts :

Rappel : nous avons la relation $\mu_i = \mu_i^0(T) + RT \ln \theta_i$ avec $\mu_i^0 = c_{p_i}(T - T_{ref}) + h_{iref} - T(c_{p_i} \ln(\frac{T}{T_{ref}}) + s_{iref})$, d'où pour l'espèce A :

$$-\omega_2 = c_{p_A} - s_{Aref} + \omega_1(-c_{p_A} T_{ref} + h_{Aref}) - c_{p_A} \ln\left(\frac{T}{T_{ref}}\right) + R \ln \theta_A \quad (.2.3)$$

$$\text{donc } \theta_A(\omega_{1_d}, \omega_{2_d}) = e^{\frac{1}{R}(-\omega_{2_d} - c_{p_A} + s_{Aref} - (c_{p_A} T_{ref} - h_{Aref})\omega_{1_d} + c_{p_A} \ln(\frac{1}{\omega_{1_d} T_{ref}}))}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta_A}{\partial \epsilon} &= \theta_A(\omega_{1_d} + \epsilon \bar{\omega}_1, \omega_{2_d} + \epsilon \bar{\omega}_2) \frac{1}{R} \times \\ &\quad \frac{\partial}{\partial \epsilon} \left(-(\omega_{2_d} + \epsilon \bar{\omega}_2) - c_{p_A} + s_{Aref} + (c_{p_A} T_{ref} - h_{Aref})(\omega_{1_d} + \epsilon \bar{\omega}_1) + c_{p_A} \ln\left(\frac{1}{(\omega_{1_d} + \epsilon \bar{\omega}_1) T_{ref}}\right) \right) \\ &= \theta_A(\omega_{1_d} + \epsilon \bar{\omega}_1, \omega_{2_d} + \epsilon \bar{\omega}_2) \frac{1}{R} \left(-\bar{\omega}_2 + (c_{p_A} T_{ref} - h_{Aref})\bar{\omega}_1 + c_{p_A} \frac{-\bar{\omega}_1}{\omega_{1_d} + \epsilon \bar{\omega}_1} \right) \end{aligned}$$

Ainsi nous obtenons

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\partial \theta_A}{\partial \epsilon} = \bar{\theta}_A = -\frac{\theta_{A_d}}{R} (\bar{\omega}_2 + h_{A_d} \bar{\omega}_1) \quad (.2.4)$$

Les flux convectifs linéarisés sont donnés par :

$$\begin{aligned}\overline{F_{conv}^A} &= -\rho v \frac{\theta_{A_d}}{R} (\bar{\omega}_2 + h_{A_d} \bar{\omega}_1) \\ \overline{F_{conv}^B} &= -\rho v \frac{\theta_{B_d}}{R} (\bar{\omega}_3 + h_{B_d} \bar{\omega}_1)\end{aligned}\quad (.2.5)$$

.2.3 Linéarisation des flux de dispersion $F_{dis}^i = -D \frac{\partial \rho_i}{\partial x} = -D \rho \frac{\partial \theta_i}{\partial x}$

Pour le terme dispersif, nous linéarisons $\frac{\partial \theta_i}{\partial x}$ par rapport aux variables d'efforts. Nous rappelons que $\bar{\theta}_A = -\frac{\theta_{A_d}}{R} (\bar{\omega}_2 + h_{A_d} \bar{\omega}_1)$

Nous avons :

$$\frac{\partial \bar{\theta}_A}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\theta_{A_d} h_{A_d}}{R} \right) \bar{\omega}_1 - \frac{\theta_{A_d} h_{A_d}}{R} \frac{\partial \bar{\omega}_1}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\theta_{A_d}}{R} \right) \bar{\omega}_2 - \frac{\theta_{A_d}}{R} \frac{\partial \bar{\omega}_2}{\partial x} \quad (.2.6)$$

Nous obtenons :

$$\begin{aligned}\overline{F_{dis}^A} &= \frac{D\rho}{R} \left(\frac{\partial \theta_{A_d} h_{A_d}}{\partial x} \bar{\omega}_1 + \theta_{A_d} h_{A_d} \frac{\partial \bar{\omega}_1}{\partial x} + \frac{\partial \theta_{A_d}}{\partial x} \bar{\omega}_2 + \theta_{A_d} \frac{\partial \bar{\omega}_2}{\partial x} \right) \\ \overline{F_{dis}^B} &= \frac{D\rho}{R} \left(\frac{\partial \theta_{B_d} h_{B_d}}{\partial x} \bar{\omega}_1 + \theta_{B_d} h_{B_d} \frac{\partial \bar{\omega}_1}{\partial x} + \frac{\partial \theta_{B_d}}{\partial x} \bar{\omega}_3 + \theta_{B_d} \frac{\partial \bar{\omega}_3}{\partial x} \right)\end{aligned}\quad (.2.7)$$

.2.4 Linéarisation de $F_{conv}^h = \rho v (\theta_A h_A + \theta_B h_B)$ et $F_{dis}^h = F_{dis}^A h_A + F_{dis}^B h_B$

Pour linéariser le flux d'enthalpie, nous commençons par linéariser $h_i(\omega_1) = c_{p_i}(\frac{1}{\omega_1} - T_{ref}) + h_{iref}$

$$\begin{aligned}\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\partial h_i}{\partial \epsilon} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \epsilon} (c_{p_i} (-\frac{1}{\omega_{1_d} + \epsilon \bar{\omega}_1} - T_{ref}) + h_{iref}) \\ &= -c_{p_i} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\bar{\omega}_1}{(\omega_{1_d} + \epsilon \bar{\omega}_1)^2} \\ &= \bar{h}_i = -\frac{c_{p_i}}{\omega_{1_d}^2} \bar{\omega}_1 = -c_{p_i} T_d^2 \bar{\omega}_1\end{aligned}\quad (.2.8)$$

Nous avons :

$$\frac{\partial}{\partial \epsilon} F_{conv}^h = \rho v \frac{\partial}{\partial \epsilon} ((\theta_{A_d} + \epsilon \bar{\theta}_A)(h_{A_d} + \epsilon \bar{h}_A) + (\theta_{B_d} + \epsilon \bar{\theta}_B)(h_{B_d} + \epsilon \bar{h}_B)) \quad (.2.9)$$

Nous avons donc :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \epsilon} (\theta_{A_d} + \epsilon \bar{\theta}_A)(h_{A_d} + \epsilon \bar{h}_A) &= 2\bar{\theta}_A \bar{h}_A \epsilon + (\theta_{A_d} \bar{h}_A + h_{A_d} \bar{\theta}_A) \\ \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \epsilon} (\theta_{A_d} + \epsilon \bar{\theta}_A)(h_{A_d} + \epsilon \bar{h}_A) &= \theta_{A_d} \bar{h}_A + h_{A_d} \bar{\theta}_A\end{aligned}$$

Ainsi :

$$\overline{F_{conv}^h} = \rho v (\theta_{A_d} \bar{h}_A + h_{A_d} \bar{\theta}_A + \theta_{B_d} \bar{h}_B + h_{B_d} \bar{\theta}_B)$$

En remplaçant les termes linéarisés, nous obtenons :

$$\overline{F_{conv}^h} = -\rho v (c_{p_d} T_d^2 + \frac{h_{A_d}^2 \theta_{A_d}}{R} + \frac{h_{B_d}^2 \theta_{B_d}}{R}) \bar{\omega}_1 - \rho v \frac{h_{A_d} \theta_{A_d}}{R} \bar{\omega}_2 - \rho v \frac{h_{B_d} \theta_{B_d}}{R} \bar{\omega}_3 \quad (.2.10)$$

avec $c_{p_d} = c_{p_A} \theta_{A_d} + c_{p_B} \theta_{B_d}$.

Le flux dispersif d'enthalpie s'écrit :

$$F_{dis}^h = F_{dis}^A h_A + F_{dis}^B h_B = -D\rho \frac{\partial \theta_A}{\partial x} h_A - D\rho \frac{\partial \theta_B}{\partial x} h_B$$

$$\frac{\partial}{\partial \epsilon} F_{dis}^h = -D\rho \frac{\partial}{\partial \epsilon} \left(\frac{\partial(\theta_{A_d} + \epsilon \bar{\theta}_A)}{\partial x} (h_{A_d} + \epsilon \bar{h}_A) + \frac{\partial(\theta_{B_d} + \epsilon \bar{\theta}_B)}{\partial x} (h_{B_d} + \epsilon \bar{h}_B) \right)$$

Nous avons :

$$\frac{\partial}{\partial \epsilon} \left(\frac{\partial(\theta_{A_d} + \epsilon \bar{\theta}_A)}{\partial x} (h_{A_d} + \epsilon \bar{h}_A) \right) = \frac{\partial}{\partial \epsilon} \left(\frac{\partial \bar{\theta}_A}{\partial x} \bar{h}_A \epsilon^2 + (h_{A_d} \frac{\partial \bar{\theta}_A}{\partial x} + \frac{\partial \theta_{A_d}}{\partial x} \bar{h}_A) \epsilon + \dots \right)$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \epsilon} \left(\frac{\partial(\theta_{A_d} + \epsilon \bar{\theta}_A)}{\partial x} (h_{A_d} + \epsilon \bar{h}_A) \right) = h_{A_d} \frac{\partial \bar{\theta}_A}{\partial x} + \frac{\partial \theta_{A_d}}{\partial x} \bar{h}_A$$

Ainsi :

$$\overline{F_{dis}^h} = -D\rho \left(h_{A_d} \frac{\partial \bar{\theta}_A}{\partial x} + \frac{\partial \theta_{A_d}}{\partial x} \bar{h}_A + h_{B_d} \frac{\partial \bar{\theta}_B}{\partial x} + \frac{\partial \theta_{B_d}}{\partial x} \bar{h}_B \right) \quad (.2.11)$$

En remplaçant les termes linéarisés :

$$\begin{aligned} \overline{F_{dis}^h} = & D\rho \left(\frac{h_{A_d}}{R} \frac{\partial h_{A_d} \theta_{A_d}}{\partial x} + \frac{h_{B_d}}{R} \frac{\partial h_{B_d} \theta_{B_d}}{\partial x} + T_d^2 (c_{p_A} \frac{\partial \theta_{A_d}}{\partial x} + c_{p_B} \frac{\partial \theta_{B_d}}{\partial x}) \right) \bar{\omega}_1 \\ & + \frac{D\rho h_{A_d}}{R} \frac{\partial \theta_{A_d}}{\partial x} \bar{\omega}_2 + \frac{D\rho h_{B_d}}{R} \frac{\partial \theta_{B_d}}{\partial x} \bar{\omega}_3 \\ & + \frac{D\rho}{R} (h_{A_d}^2 \theta_{A_d} + h_{B_d}^2 \theta_{B_d}) \frac{\partial \bar{\omega}_1}{\partial x} + \frac{D\rho h_{A_d} \theta_{A_d}}{R} \frac{\partial \bar{\omega}_2}{\partial x} + \frac{D\rho h_{B_d} \theta_{B_d}}{R} \frac{\partial \bar{\omega}_3}{\partial x} \end{aligned} \quad (.2.12)$$

.2.4.1 Linéarisation de la réaction

Nous rappelons la cinétique de réaction modélisée par la loi d'Arrhenius :

$$r = k_0 \rho \frac{\theta_A}{M_A} e^{-\frac{E}{RT}} = k_0 \rho \frac{\theta_A}{M_A} e^{-\frac{E}{R} \omega_1} \quad (.2.13)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial r}{\partial \epsilon} &= \frac{k_0 \rho}{M_A} \frac{\partial}{\partial \epsilon} ((\theta_{A_d} + \epsilon \bar{\theta}_A) e^{-\frac{E}{R} (\omega_{1_d} + \epsilon \bar{\omega}_1)}) \\ &= \frac{k_0 \rho}{M_A} (\bar{\theta}_A e^{-\frac{E}{R} (\omega_{1_d} + \epsilon \bar{\omega}_1)} + (\theta_{A_d} + \epsilon \bar{\theta}_A) e^{-\frac{E}{R} (\omega_{1_d} + \epsilon \bar{\omega}_1)} (-\frac{E}{R} \bar{\omega}_1)) \end{aligned}$$

Ainsi nous obtenons :

$$\bar{r} = \frac{k_0 \rho}{M_A} (\bar{\theta}_A e^{-\frac{E}{R} \omega_{1d}} - \frac{E}{R} \bar{\omega}_1 \theta_{A_d} e^{-\frac{E}{R} \omega_{1d}}) \quad (.2.14)$$

Avec $\bar{\theta}_A = -\frac{\theta_{A_d}}{R} (\bar{\omega}_2 + h_{A_d} \bar{\omega}_1)$ et $r_d = k_0 \rho \frac{\theta_{A_d}}{M_A} e^{-\frac{E}{R} \omega_{1d}}$

$$\bar{r} = -\frac{r_d}{R} (h_{A_d} + E) \bar{\omega}_1 - \frac{r_d}{R} \bar{\omega}_2 \quad (.2.15)$$

.2.4.2 Le modèle linéarisé

Avec tous les lois constitutives linéarisé, nous écrivons donc le système linéarisé sous forme matricielle ci-dessous :

$$\frac{dz}{dt} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(\alpha \begin{pmatrix} \omega_1 \\ \omega_2 \\ \omega_3 \end{pmatrix} - \beta \begin{pmatrix} \frac{\partial \omega_1}{\partial x} \\ \frac{\partial \omega_2}{\partial x} \\ \frac{\partial \omega_3}{\partial x} \end{pmatrix} \right) + \alpha_R \begin{pmatrix} \omega_1 \\ \omega_2 \\ \omega_3 \end{pmatrix} \quad (.2.16)$$

z est le vecteur de variables d'état $(h, \rho_A, \rho_B)^T$,

où

$$\alpha = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3 \\ \alpha_4 & \alpha_5 & 0 \\ \alpha_6 & 0 & \alpha_7 \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 \\ \beta_2 & \beta_4 & 0 \\ \beta_3 & 0 & \beta_5 \end{pmatrix} \quad \alpha_R = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \alpha_{R1} & \alpha_{R2} & 0 \\ -\alpha_{R1} & -\alpha_{R2} & 0 \end{pmatrix} \quad (.2.17)$$

TABLE 1 – Coefficients du modèle linéarisé

α_1	$\lambda_c \frac{\partial(T_d^2)}{\partial x} - \rho v (c_{p_d} T_d^2 + \frac{h_{A_d}^2 \theta_{A_d}}{R} + \frac{h_{B_d}^2 \theta_{B_d}}{R}) + \eta$	α_2	$-\frac{\rho v h_{A_d} \theta_{A_d}}{R} + \frac{D \rho h_{A_d}}{R} \frac{\partial \theta_{A_d}}{\partial x}$
α_3	$-\frac{\rho v h_{B_d} \theta_{B_d}}{R} + \frac{D \rho h_{B_d}}{R} \frac{\partial \theta_{B_d}}{\partial x}$	α_4	$-\frac{\rho v h_{A_d} \theta_{A_d}}{R} + \frac{D \rho}{R} \frac{\partial}{\partial x} (h_{A_d} \theta_{A_d})$
α_5	$-\frac{\rho v \theta_{A_d}}{R} + \frac{D \rho}{R} \frac{\partial \theta_{A_d}}{\partial x}$	α_6	$-\frac{\rho v h_{B_d} \theta_{B_d}}{R} + \frac{D \rho}{R} \frac{\partial}{\partial x} (h_{B_d} \theta_{B_d})$
α_7	$-\frac{\rho v \theta_{B_d}}{R} + \frac{D \rho}{R} \frac{\partial \theta_{B_d}}{\partial x}$	β_1	$-\lambda_c T_d^2 - \frac{D \rho}{R} (h_{A_d}^2 \theta_{A_d} + h_{B_d}^2 \theta_{B_d})$
β_2	$-\frac{D \rho h_{A_d} \theta_{A_d}}{R}$	β_3	$-\frac{D \rho h_{B_d} \theta_{B_d}}{R}$
β_4	$-\frac{D \rho \theta_{A_d}}{R}$	β_5	$-\frac{D \rho \theta_{B_d}}{R}$
α_{R1}	$\frac{r_d}{R} (h_{A_d} + E)$	α_{R2}	$\frac{r_d}{R}$
η	$D \rho (h_{A_d} \frac{\partial}{\partial x} (h_{A_d} \theta_{A_d}) + h_{B_d} \frac{\partial}{\partial x} (h_{B_d} \theta_{B_d}) + T_d^2 (c_{p_A} \frac{\partial \theta_{A_d}}{\partial x} + c_{p_B} \frac{\partial \theta_{B_d}}{\partial x}))$		

Les matrices α, β, α_R sont des matrices constantes dépendant de variable d'espace x .

.3 Transparent de soutenance

Approche thermodynamique pour la commande d'un système non linéaire de dimension infinie : application à un réacteur tubulaire

Directeurs de thèse : **M. Françoise Couenne**, **M. Yann Le Gorrec** et **M. Boussad Hamroun**

Weijun ZHOU

Laboratoire d'Automatique et de Génie des Procédés, UMR CNRS 5007
Université Claude Bernard Lyon I
Villeurbanne, France

22 Juin 2015

Weijun ZHOU (LAGEP, UCBL) Soutenance de thèse 22 Juin 2015 1 / 42

Contexte

Réacteur tubulaire

- des tubes dont la longueur peut atteindre jusqu'à plusieurs dizaines de mètres
- à l'intérieur desquelles ont lieu des réactions



Figure: Un réacteur tubulaire(<http://www.bachiller.com>)

Weijun ZHOU (LAGEP, UCBL) Soutenance de thèse 22 Juin 2015 2 / 42

Contexte

Commande des réacteurs

- Sécurité du réacteur
- Qualité des produits

Représentation du réacteur tubulaire

- convection, dispersion, réaction
- représenté par des équations aux dérivées partielles **non-linéaires**

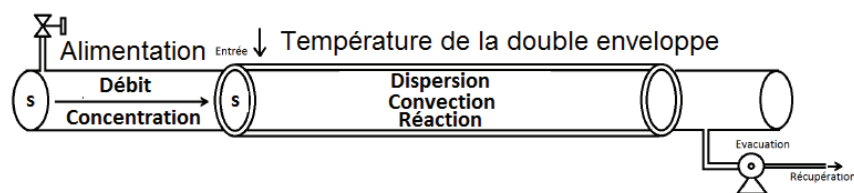


Figure: Représentation du réacteur tubulaire

Motivation et résultats existants

Combinaison des **propriétés thermodynamiques** avec la **structure géométrique** du modèle du réacteur tubulaire pour la **synthèse de commande**

Résultats existants

- **Commande non-linéaire thermodynamique en dimension finie**
Commande stabilisante du RPAC [Hoang, 2009] en utilisant la **disponibilité thermodynamique** [Alonso and Ydstie, 2001]
- **Représentation hamiltonienne à port**
Pour les systèmes à paramètres distribués par la structure de **Stokes-Dirac** [Maschke and Van der Schaft, 2005][Le Gorrec et al., 2006].

Points abordés dans la thèse

- Commande basée sur des fonctions de Lyapunov issues de la thermodynamique sur des représentations thermodynamiques du réacteur tubulaire
- Représentation Hamiltonienne à port d'un système réaction-diffusion **non-isotherme**

Plan de la présentation

- ① Modélisation d'un réacteur tubulaire
- ② La disponibilité thermodynamique
- ③ Commande stabilisante distribuée du réacteur tubulaire
- ④ Représentation hamiltonienne à port
- ⑤ Conclusion et Perspectives

Modélisation d'un réacteur tubulaire

- Rappels de thermodynamique
- Représentation entropique
- Représentation énergétique
- Conditions frontières

Représentation entropique du réacteur tubulaire

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\frac{\partial F_{conv}^h}{\partial x} - \frac{\partial F_{cond}^h}{\partial x} - \frac{\partial F_{dis}^h}{\partial x} + q \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = -\frac{\partial F_{conv}^A}{\partial x} - \frac{\partial F_{dis}^A}{\partial x} - \nu_A r \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho_B}{\partial t} = -\frac{\partial F_{conv}^B}{\partial x} - \frac{\partial F_{dis}^B}{\partial x} + \nu_B r \quad (3)$$

avec $F_{conv}^h = \sum_1^n F_{conv}^i h_i$, $F_{dis}^h = \sum_1^n F_{dis}^i h_i$, h_i l'enthalpie spécifique de l'espèce i

Représentation entropique sous forme vectorielle avec $z^T = (h \quad \rho_A \quad \rho_B)$

$$\frac{\partial z}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} F(z, x, t) + R(z, x, t) + gq(z, x, t) \quad (4)$$

F est le vecteur de flux total (dispersion et convection).

R est le vecteur de la réaction.

$g^T = (1 \quad 0 \quad 0)$, q est le vecteur d'échange thermique avec la double enveloppe.

Représentation énergétique du réacteur tubulaire

$$\frac{\partial s}{\partial t} = -\frac{\partial F_{conv}^s}{\partial x} - \frac{\partial F_{cond}^s}{\partial x} - \frac{\partial F_d^s}{\partial x} - \frac{q}{T_j} + \sigma_s \quad (5)$$

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = -\frac{\partial F_{conv}^A}{\partial x} - \frac{\partial F_{dis}^A}{\partial x} - \nu_A r \quad (6)$$

$$\frac{\partial \rho_B}{\partial t} = -\frac{\partial F_{conv}^B}{\partial x} - \frac{\partial F_{dis}^B}{\partial x} + \nu_B r \quad (7)$$

avec $F_{conv}^s = \sum_1^n F_{conv}^i s_i$, $F_{dis}^s = \sum_1^n F_{dis}^i s_i$, s_i l'entropie spécifique de l'espèce i

$$\sigma_s = q\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_j}\right) - \frac{1}{T} \sum_{i=1}^n \mu_i M_i \nu_i r - \frac{1}{T} \sum_{i=1}^n F_{dis}^i \frac{\partial \mu_i}{\partial x} - \frac{1}{T} F_{dis}^s \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{1}{T} F_{cond}^s \frac{\partial T}{\partial x} \quad (8)$$

Les conditions à la frontière en vision entropique

Les hypothèses sur les conditions frontières

Il n'y a que l'espèce A à l'entrée du réacteur convectée à la même vitesse que dans le réacteur.

Il n'y a pas de dispersion thermique à l'extérieur du réacteur.

A la sortie, le réacteur est ouvert à la dispersion et à la dispersion thermique.

A l'entrée

$$v\rho A_{in} = F_{in}^A|_{0-} = (F_{dis}^A + F_{conv}^A)|_{0+} \quad (9)$$

$$0 = F_{in}^B|_{0-} = (F_{dis}^B + F_{conv}^B)|_{0+} \quad (10)$$

$$F_{in}^h|_{0-} = (F_{dis}^h + F_{conv}^h)|_{0+} \quad (11)$$

En sortie :

$$F_{dis}^A|_L = 0, \quad (12)$$

$$F_{dis}^B|_L = 0 \quad (13)$$

$$F_{dis}^h|_L = 0 \quad (14)$$

Les fonctions de disponibilité thermodynamique

- Fonction de la disponibilité
- Fonction de la disponibilité réduite
- Quelques résultats de simulation

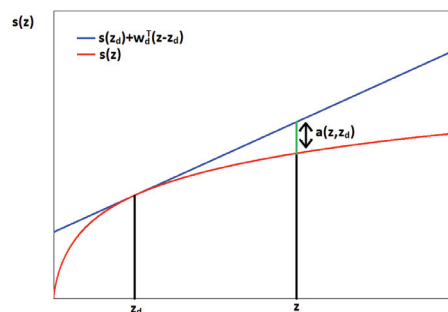
La disponibilité thermodynamique en vision entropique

l'entropie s

- Par définition $s = w^T z$ avec z le vecteur des variables extensives, $w(z)$ celui des variables intensives.
- L'entropie est une fonction concave par rapport à z (second principe)

La disponibilité a est l'écart entre l'hyperplan tangent à s en $z = z_d$ et s

$$a(z) = s(z_d) + w_d^T (z - z_d) - s(z) = -\tilde{w}^T z = -(w - w_d)^T z \quad (15)$$



La disponibilité thermodynamique en dimension infinie

L'entropie n'est pas **strictement** concave (mélange monophasique)

⇒ Une contrainte sur les variables d'états extensives est nécessaire pour la rendre strictement concave [Alonso and Ydstie, 2001].

Nous proposons que $\rho = \rho_A + \rho_B$ est constante.

Propriétés

Si l'entropie s est strictement concave alors

- 1 a est strictement convexe
- 2 $a(z) > 0$, $z \neq z_d$
- 3 $a(z) = 0$, $z = z_d$

La fonction de disponibilité est une **fonction de Lyapunov candidate** pour la synthèse de commande.

La disponibilité thermodynamique réduite a_r

La fonction de disponibilité se décompose en deux parties :

$$a(z) = -\tilde{w}^T z = \underbrace{-\tilde{w}_r^T z}_{a_r(z)} + \underbrace{-\tilde{w}_m^T z}_{a_m(z)}$$

A partir de la décomposition de la variable intensive w_i

$$w_i = -\frac{\mu_i}{T} = \underbrace{\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_d}\right)(c_{pA} T_{ref} - h_{Aref}) + c_{pA} \ln\left(\frac{T}{T_d}\right)}_{w_{r_i}} + \underbrace{R \ln(\theta_i)}_{w_{m_i}} \quad (16)$$

- La **contribution thermique** $a_r(z)$: la *disponibilité réduite*
- La contribution due au **mélange** $a_m(z)$

$$\tilde{w} = \begin{pmatrix} \frac{1}{T} - \frac{1}{T_d} \\ -\frac{\mu_A}{T} + \frac{\mu_{Ad}}{T_d} \\ -\frac{\mu_B}{T} + \frac{\mu_{Bd}}{T_d} \end{pmatrix} \quad \tilde{w}_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{T} - \frac{1}{T_d} \\ \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_d}\right)(c_{pA} T_{ref} - h_{Aref}) + c_{pA} \ln\left(\frac{T}{T_d}\right) \\ \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_d}\right)(c_{pB} T_{ref} - h_{Bref}) + c_{pB} \ln\left(\frac{T}{T_d}\right) \end{pmatrix} \quad (17)$$

Les propriétés de la disponibilité réduite

Propriétés

- 1 a_r est convexe
- 2 $a_r(z) > 0$, $T \neq T_d$
- 3 $a_r(z) = 0$, $T = T_d$

a_r s'annule sur le sous espace de l'espace d'état défini par:

$$T = T_d \Leftrightarrow h + (c_{pA}(T_{ref} - T_d) - h_{Aref})\rho_A + (c_{pB}(T_{ref} - T_d) - h_{Bref})\rho_B = 0$$

Propriétés

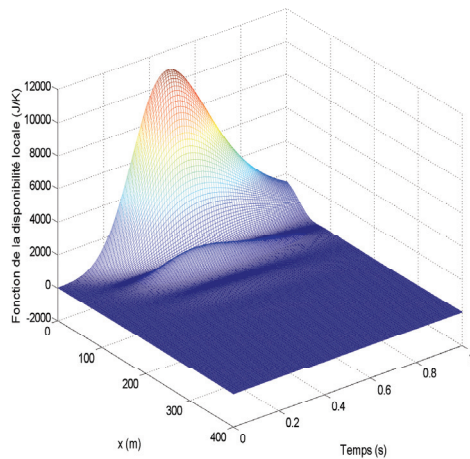
Si à toute température T stationnaire à l'intérieur du réacteur tubulaire correspond une seule répartition des concentrations ρ_A, ρ_B alors

- 1 a_r est strictement convexe
- 2 $a_r(z) > 0$, $z \neq z_d$
- 3 $a_r(z) = 0$, $z = z_d$

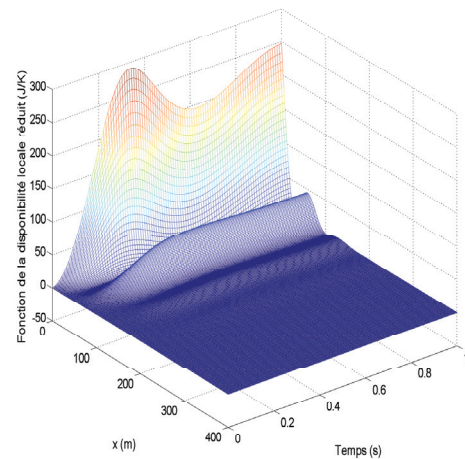
a_r est une **fonction de Lyapunov candidate** pour la **synthèse de commande**.

Quelques résultats de simulation

Expérience : échelon uniforme de $T_j = 350K$ à $T_j = 370K$
 z_d correspond au profil stationnaire à $T_j = 370K$.



(a) La disponibilité



(b) La disponibilité réduite

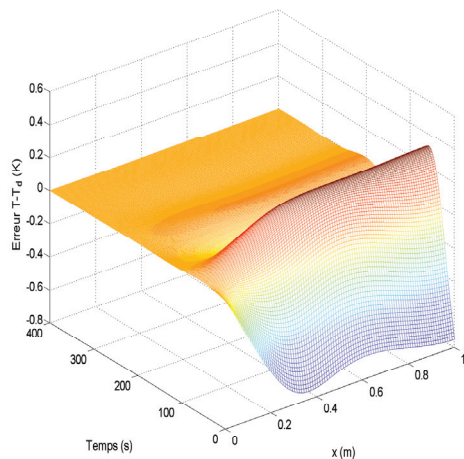
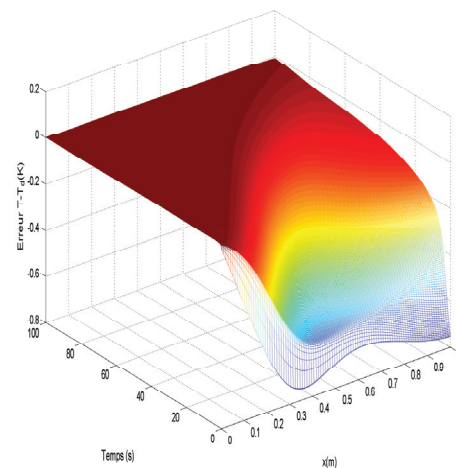
Commande stabilisante distribuée

- Commande stabilisante avec la disponibilité
- Commande stabilisante avec la disponibilité réduite
- Approche pratique de la commande distribuée

Résultats de simulation : Proposition 1

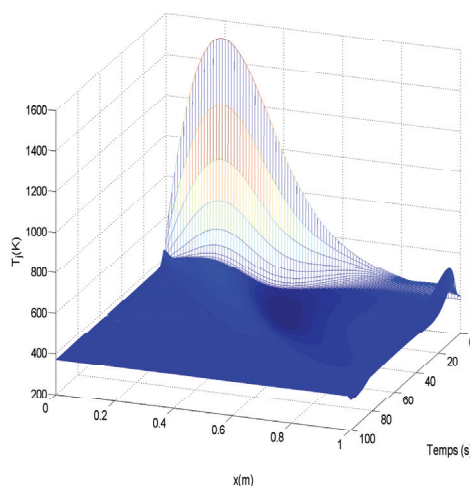
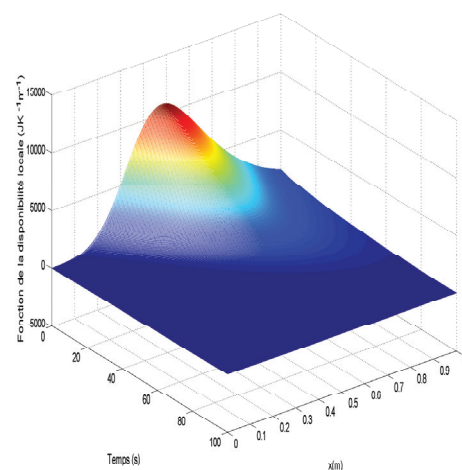
Amélioration du temps de réponse de 250s en BO à 100s en BF

$$K = \begin{pmatrix} K_1(x, t) & 0I_d & 0I_d \\ 0I_d & \frac{K_1(x, t)}{100} & 0I_d \\ 0I_d & 0I_d & \frac{K_1(x, t)}{100} \end{pmatrix}, K_1(x, t) = \delta \exp^{-\frac{x}{2}} + \delta v t (1 - \exp^{-\frac{x}{2}}), \text{ avec } \delta = 6000$$

(a) Erreur $(T - T_d)$ en boucle ouverte(b) Erreur $(T - T_d)$ en boucle fermée

Résultats de simulation : Proposition 1

Amplitude de T_{j1} assez importante et la disponibilité converge vers zéro

(a) La commande T_{j1} 

(b) a en boucle fermée

Le problème de commande et sa solution

Problème de synthèse 3 : Trouver $q(x)$ telle que A_r en boucle fermée satisfait

$$\frac{dA_r(z)}{dt} = \frac{d}{dt} \int_0^L a_r(z) dx = \int_0^L (-\tilde{w}_r^T (R + gq) + \tilde{w}_r^T \frac{\partial F}{\partial x}) dx = - \int_0^L \tilde{z}^T K \tilde{z} dx$$

Avec $\tilde{z} = z - z_d$, K est une matrice définie positive

Proposition 3

Considérons le système : $\partial_t z = -\partial_x F + R + gq$ sous les hypothèses énoncées précédemment alors avec la commande

$$q(x, t) = \left[\tilde{w}_r^T \frac{\partial F}{\partial x} - \tilde{w}_r^T R + \tilde{z}^T K \tilde{z} \right] \tilde{w}_h^{-1}$$

le système en boucle fermée converge asymptotiquement vers le profil d'équilibre désiré.

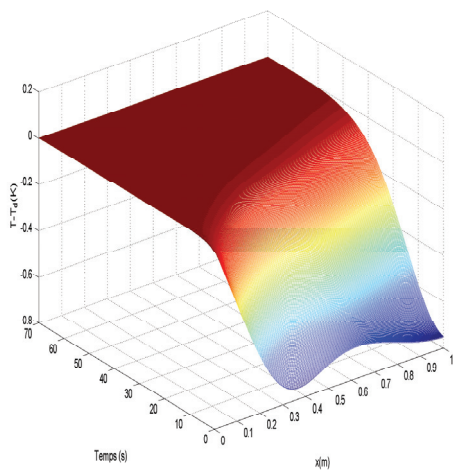
Problème de synthèse 4 : Trouver $q(x)$ telle que A_r en boucle fermée satisfait

$$\frac{dA_r(z)}{dt} = - \int_0^L K_s a_r(z) dx$$

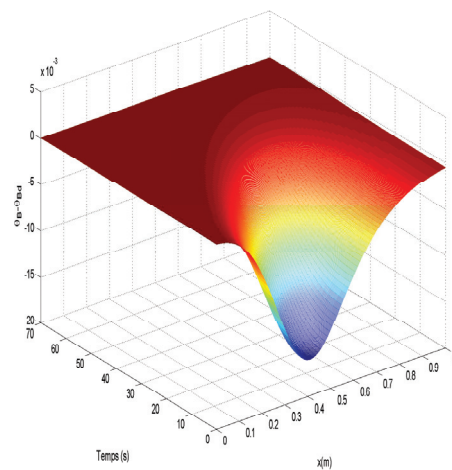
Avec $K_s > 0 \Rightarrow$ **Proposition 4 :** Convergence asymptotique vers le profil d'équilibre désiré.

Résultats de simulation : Proposition 3

Amélioration du temps de réponse de 60s avec T_{j_3} contre 100s avec T_{j_1} , $\delta = 350$



(a) Erreur ($T - T_d$)

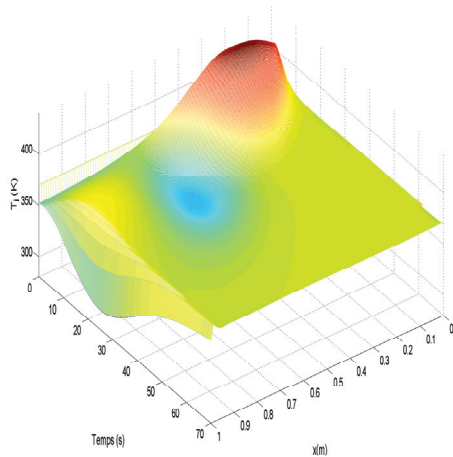
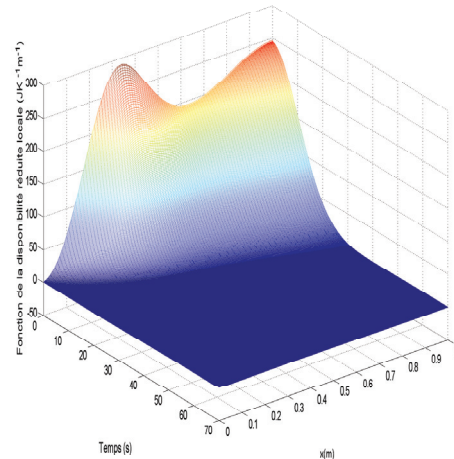


(b) Erreur ($\theta_B - \theta_{B_d}$)

Figure

Résultats de simulation : Proposition 3

Amélioration d'amplitude de température de commande de **450K** avec T_{j_3} contre **1500K** avec T_{j_1}

(a) La commande T_{j_3} (b) a_r en boucle fermée

Approche pratique : Commande uniforme

Problème de synthèse 5 : commande uniforme le long du réacteur.

Trouver q **uniforme** telle que A_r en boucle fermée satisfait

$$\frac{dA_r(z)}{dt} = -\left(\int_0^L \tilde{w}^T dx\right) g q + \int_0^L (-\tilde{w}_r^T R + \tilde{w}_r^T \frac{\partial F}{\partial x}) dx = -\int_0^L \tilde{z} K \tilde{z} dx$$

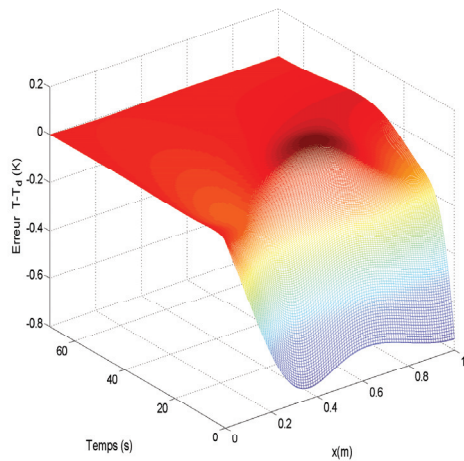
Avec K est une matrice définie positive

Proposition 5

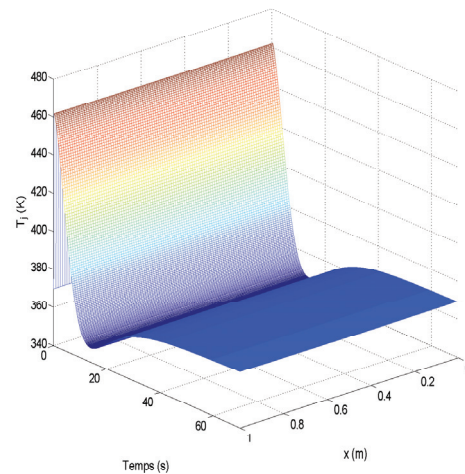
Le système (4) en boucle fermée avec la loi de commande suivante pour T_j (supposée uniforme): $T_{j_5}(t) = \frac{\int_0^L (C \tilde{w}_h T(x,t) + \tilde{w}_r^T \frac{\partial F}{\partial x} - \tilde{w}_r^T R + \tilde{z} K(z) \tilde{z}) dx}{C \int_0^L \tilde{w}_h dx}$ est globalement asymptotiquement stable en z_d . Avec $K(z)$ une matrice définie positive de z .

Approche pratique : Commande uniforme

Amélioration du temps de réponse de de 200s en BO à 60s en BF
 $\delta = 1400$



(a) Erreur ($T - T_d$)



(b) La commande T_{j5}

Conclusion et perspective

- Commande basée sur fonction de Lyapunov
 - La disponibilité thermodynamique
 - la disponibilité thermodynamique réduite
- Stabilisation à un profil d'équilibre
- Diminution de temps de réponse
- **Commande uniforme**
- Rejet de perturbation sur des perturbations en entrée mais aussi en d'autres points
- Optimiser les gains des différentes commandes en respectant le caractère bien-posé de la commande

Représentation hamiltonienne à port

- Système hamiltonien à port pour les systèmes thermodynamiques
- Application au système réaction-diffusion en représentation énergétique

Rappel : formulation hamiltonienne pour les systèmes thermodynamiques

En dimension finie :

- Représentation [pseudo hamiltonienne](#) du modèle du [RPAC](#) [[Hoang, 2009](#)]
 - Matrices de structure dépendent des variables d'effort
 - Décomposition d'opérateur en une partie symétrique et une partie antisymétrique
- [Système Hamiltonien à Port Irréversible \(IPHS\) RPAC](#) [[Ramirez, 2012](#)]
 - Matrices de structure pré multipliées par une fonction de modulation dépendant des variables d'effort.

En dimension infinie :

- Représentation hamiltonienne à port pour un système [isotherme](#) (procédé d'adsorption) [[Baaij et al., 2009](#)]
 - Structure Stokes-Dirac
- Paramétrisation des conditions frontière des réacteurs tubulaires [isothermes](#) basée sur la représentation hamiltonienne à port [[Le Gorrec et al., 2006](#)]

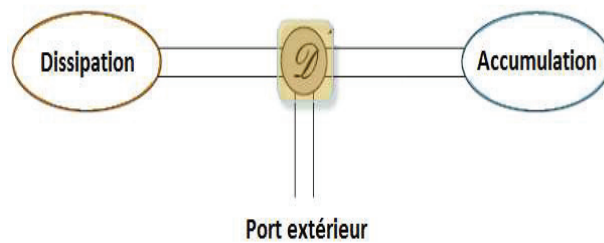
Structure Stokes-Dirac

Définition de structure Stokes-Dirac

Une structure de Stokes-Dirac \mathcal{D} est un sous espace de $\mathcal{P} = \mathcal{F} \times \mathcal{E}$ maximale-ment isotropique par rapport au produit symétrisé

$$\langle\langle (e_1, f_1), (e_2, f_2) \rangle\rangle := \langle e_2 | f_1 \rangle + \langle e_1 | f_2 \rangle \quad \forall (e_i, f_i) \in \mathcal{P} \quad (19)$$

soit : $\mathcal{D} = \mathcal{D}^\perp$ avec $\mathcal{D}^\perp = \left\{ p \in \mathcal{P} \mid \langle\langle p, p_1 \rangle\rangle = 0, \forall p_1 \in \mathcal{D} \right\}$

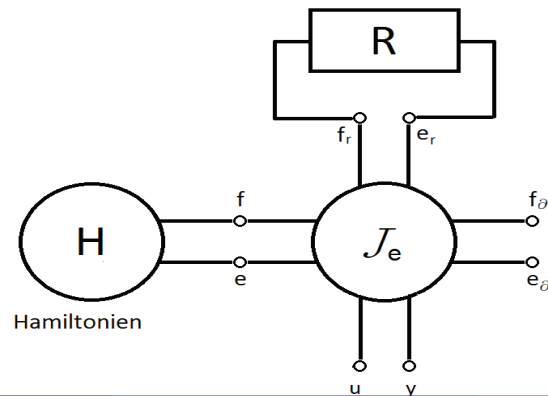


Forme canonique de la structure Stokes-Dirac : cas avec dissipation

Représentation : [Maschke and Van der Schaft, 2005]

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial z}{\partial t} \\ e_r \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \mathcal{J} & \mathcal{G} \\ -\mathcal{G}^* & 0 \end{pmatrix}}_{\mathcal{J}_e} \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial z} \\ f_r \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathcal{B} \\ 0 \end{pmatrix} u \quad \text{avec } f_r = Re_r \quad (20)$$

- (f_r, e_r) : variable de port lié à la dissipation
- \mathcal{G} et son adjoint \mathcal{G}^* : opérateur relié à la variable dissipative

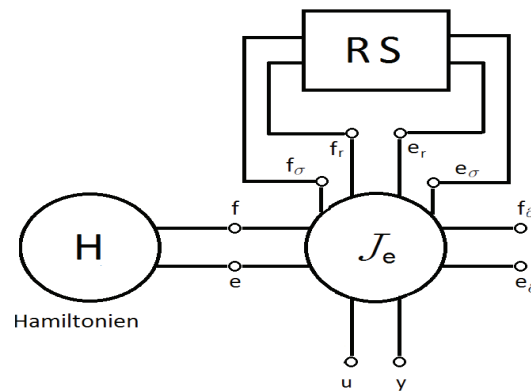


Système irréversible

Représentation en vision énergétique :

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial z}{\partial t} \\ e_r \\ e_\sigma \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \mathcal{J} & \mathcal{G} & \mathcal{G}_\sigma \\ -\mathcal{G}^* & 0 & 0 \\ -\mathcal{G}_\sigma^* & 0 & 0 \end{pmatrix}}_{\mathcal{J}_e} \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial z} \\ f_r \\ f_\sigma \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathcal{B} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} u \quad (21)$$

avec $f_r = Re_r$, $f_\sigma e_\sigma + f_r e_r = 0$



Système irréversible

le premier principe thermodynamique

$$\begin{aligned} \frac{dH}{dt} &= \int_a^b \underbrace{\frac{\delta H}{\delta x}}_{e^T} \underbrace{\frac{\partial x}{\partial t}}_f dz = \int_a^b \underbrace{(\mathcal{G}^* \frac{\delta H}{\delta x})^T}_{-e_r^T} \underbrace{R \mathcal{G}^* \frac{\delta H}{\delta x}}_{-f_r} dz + \int_a^b \underbrace{\frac{\delta H}{\delta x}}_{-y^T} \mathcal{B} u dz - e_\theta^T f_\theta \\ &\quad + \int_a^b \underbrace{-(\frac{\delta H}{\delta x})^T}_{e_\sigma^T} \mathcal{G}_\sigma f_\sigma dz \end{aligned} \quad (22)$$

Le produit de puissance associé s'écrit :

$$\langle e | f \rangle - \underbrace{\langle e_r | f_r \rangle + \langle e_\sigma | f_\sigma \rangle}_{=0} + \langle y | u \rangle + \langle e_\theta | f_\theta \rangle|_{\mathbb{R}} = 0 \quad (23)$$

le deuxième principe thermodynamique

avec $e_\sigma = T$ et $f_\sigma = -\sigma$ nous avons:

$$\begin{cases} e_r^T f_r = -e_\sigma^T f_\sigma = T\sigma \\ f_r = Re_r \end{cases} \implies \sigma = \frac{e_r^T Re_r}{T} > 0 \quad (24)$$

Représentation hamiltonienne à port en vision énergétique

Table: Récapitulatif

f	e
$F_A = \rho \partial_t \theta_A$	$e_A = \mu_A$
$F_B = \rho \partial_t \theta_B$	$e_B = \mu_B$
$F_s = \rho \partial_t s$	$e_s = T$
f_r	e_r
$f_A = F_A^{dis}$	$E_A = -\partial_x \mu_A$
$f_B = F_B^{dis}$	$E_B = -\partial_x \mu_B$
$f_s = F_s^{dis}$	$E_s = -\partial_x T$
$f_R = r$	$E_r = \mathcal{A}$
f_σ	e_σ
$f_{\sigma_A} = -\sigma_A$	$e_{\sigma_A} = T$
$f_{\sigma_B} = -\sigma_B$	$e_{\sigma_B} = T$
$f_{\sigma_s} = -\sigma_s$	$e_{\sigma_s} = T$
$f_{\sigma_r} = -\sigma_r$	$e_{\sigma_r} = T$
f_∂	e_∂
$f_\partial^A = f_A _{0,L}$	$e_\partial^A = e_A _{0,L}$
$f_\partial^B = f_B _{0,L}$	$e_\partial^B = e_B _{0,L}$
$f_\partial^s = f_s _{0,L}$	$e_\partial^s = e_s _{0,L}$
$u = -\frac{q}{T}$	$y = T$

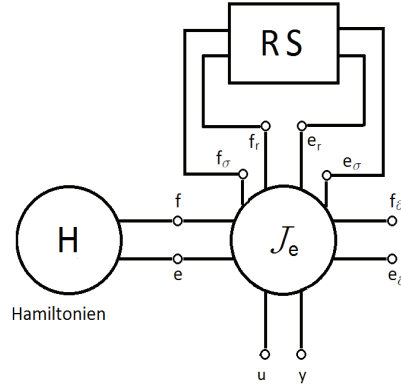


Figure: Structure d'interconnexion pour un système irréversible

Représentation hamiltonienne à port en vision énergétique

$$\begin{cases} F = \mathcal{J}_e E + \mathcal{B}_e u \\ y = -\mathcal{B}_e^* E \end{cases} \quad (27)$$

$$\text{où } E = \begin{pmatrix} e^T & f_r^T & f_\sigma^T \end{pmatrix}, F = \begin{pmatrix} f^T & e_r^T & e_\sigma^T \end{pmatrix}$$

\mathcal{J}_e est un opérateur antisymétrique différentiel donné par:

$$\mathcal{J}_e = \begin{pmatrix} \mathcal{J} & \mathcal{G} & \mathcal{G}_\sigma \\ -\mathcal{G}^* & 0 & 0 \\ -\mathcal{G}_\sigma^* & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (28)$$

avec

$$\mathcal{J} = 0_3 \quad (29)$$

$$\mathcal{G} = \begin{pmatrix} -\partial_x & 0 & 0 & -\nu_A M_A \\ 0 & -\partial_x & 0 & \nu_B M_B \\ 0 & 0 & -\partial_x & 0 \end{pmatrix}, \mathcal{G}_\sigma = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \quad (30)$$

Représentation hamiltonienne à port en vision énergétique

Nous définissons les ensembles \mathcal{F} et \mathcal{E} ainsi que le produit de puissance :

$$\left\langle \begin{bmatrix} E \\ y \\ e_\partial \end{bmatrix} \middle| \begin{bmatrix} F \\ u \\ f_\partial \end{bmatrix} \right\rangle := \langle E, F \rangle_{L^2} + \langle y, u \rangle_{L^2} + \langle e_\partial^L, f_\partial^L \rangle_{R^3} - \langle e_\partial^0, f_\partial^0 \rangle_{R^3} \quad (31)$$

Proposition

Le sous-ensemble linéaire $\mathcal{D} \subset \mathcal{E} \times \mathcal{F}$ définie par:

$$\mathcal{D} = \left\{ \left(\begin{bmatrix} F \\ u \\ f_\partial \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} E \\ y \\ e_\partial \end{bmatrix} \right) \in \mathcal{E} \times \mathcal{F} \mid F = \mathcal{J}_e E + \begin{pmatrix} \mathcal{B} \\ 0_{3 \times 1} \\ 0_{5 \times 1} \end{pmatrix} u, \right. \\ \left. y = -[\mathcal{B}^* \ 0_{1 \times 3} \ 0_{1 \times 5}] E, \begin{pmatrix} e_\partial \\ f_\partial \end{pmatrix} (0, L) = \begin{pmatrix} I_3 & 0_{3 \times 3} & 0_{3 \times 5} \\ 0_{3 \times 3} & I_3 & 0_{3 \times 5} \end{pmatrix} E|_{0,L} \right\} \text{ est une}$$

structure de Stokes Dirac construite à partir du produit bilinéaire (31) avec

- l'opérateur antisymétrique \mathcal{J}_e ,
- l'opérateur d'entrée $\mathcal{B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}^T$.

Conclusion

- Représentation hamiltonienne en vision énergétique du système réaction diffusion avec un élément du type dissipation source pour satisfaire le premier principe et le deuxième principe
- Représentation hamiltonienne en vision entropique

Conclusion générale

- **Utilisation de la disponibilité et la disponibilité réduite pour la synthèse de commande distribuée pour le réacteur tubulaire**
- **Représentation hamiltonienne à port pour des systèmes irréversibles non-isotherme en dimension infinie**
Structure d'interconnexion reliant dissipation d'énergie et production irréversible d'entropie

Perspective

Commande stabilisante :

- Trouver un modèle avec trois profils d'équilibre
- Définir une nouvelle fonction de Lyapunov à partir de a_r et a_m (s'affranchir des hypothèses d'unicité)

Représentation hamiltonienne à port du réacteur tubulaire :

- Prise en compte du phénomène de convection
- Réduction spatiale géométrique par une méthode par éléments finis mixtes
- Loi de commande passive

Problème de commande à la frontière :

- Paramétrisation des variables aux frontières pour un réacteur tubulaire isotherme assurant le caractère bien-posé du système \Rightarrow Analyse sur le linéarisé du modèle dans le cas non isotherme